

**Einfluss der Staubeigenschaften auf das
D/H Isotopenverhältnis und die
Häufigkeiten wichtiger präbiotischer
Spezies im Solaren Nebel**

Von der Fakultät für Elektrotechnik, Informationstechnik, Physik
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig

zur Erlangung des Grades eines Doktors

der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)

genehmigte Dissertation

von Stefan Kupper

aus Blankenburg/Harz

eingereicht am: 12.02.2015

Disputation am: 15.07.2015

1.Referent: Prof. Dr. Uwe Motschmann

2.Referent: Prof. Dr. Jürgen Blum

3.Referent: Prof. Dr. Andreas Hördt

Druckjahr: 2015

Einfluss der Staubeigenschaften auf das D/H Isotopenverhältnis und die Häufigkeiten wichtiger präbiotischer Spezies im Solaren Nebel



Stefan Kupper

DLR, Institut für Planetenforschung, Berlin

TU Braunschweig, Institut für Theoretische Physik, Braunschweig

Vorveröffentlichungen der Dissertation

Teilergebnisse aus dieser Arbeit wurden mit Genehmigung der Gemeinsamen Naturwissenschaftlichen Fakultät, vertreten durch den Mentor der Arbeit, in folgenden Beiträgen vorab veröffentlicht:

Veröffentlichungen

- **S. Kupper, C. Tornow, and P. Gast**, “*Two Different Sources of Water for the Early Solar Nebula*”, *Origins of Life and Evolution of the Biosphere*, vol. 42, pp. 81–92, June 2012.
- **E. Kuehrt, C. Tornow, S. Kupper, and P. Gast**, “*Two Different Sources of Water in Earth’s Accretion Zone of the Solar Nebula*”, in *American Astronomical Society Meeting Abstracts*, vol. 220 of *American Astronomical Society Meeting Abstracts*, p. 523.13, May 2012.
- **C. Tornow, S. Kupper, M. Ilgner, E. Kuehrt, and U. Motschmann**, “*Composition of LHB Comets and Their Influence on the Early Earth Atmosphere Composition*”, in *Meteoroids: The Smallest Solar System Bodies* (W. J. Cooke, D. E. Moser, B. F. Hardin, and D. Janches, eds.), p. 192, July 2011.
- **C. Tornow, E. Kuehrt, S. Kupper, and U. Motschmann**, “*Interaction between gas and ice phase in the three periods of the solar nebula*”, in *IAU Symposium* (J. A. Fernández, D. Lazzaro, D. Prialnik, and R. Schulz, eds.), vol. 263 of *IAU Symposium*, pp. 50–54, 2010.
- **C. Tornow, P. Gast, S. Kupper, I. Pelivan, E. Kuehrt, U. Motschmann**, “*Water formation in the early solar nebula: I. The quasi-stationary cloud core*”, *Planetary and Space Science*, vol. 98, pp. 216–232, Aug. 2014
- **C. Tornow, P. Gast, U. Motschmann, E. Kuehrt, S. Kupper, I. Pelivan**, “*Water formation in the early solar nebula: II. The collapsing cloud core*”, *Planetary and Space Science*, vol. 98, pp. 233–253, Aug. 2014
- **C. Tornow, P. Gast, I. Pelivan, S. Kupper, E. Kuehrt, U. Motschmann**, “*Simulating the D/H ratio of water formed in the early solar nebula*”, *Geochemical Journal*, vol. 48(6), pp. 527–547, 2014

Konferenzen & Internationale Workshops

- **2nd HGF Alliance Week**, Berlin, Deutschland, 2009, Vortrag: "*Evolution of dust in the early solar nebula*"
- **42nd IUPAC Congress**, Glasgow, UK, 2009, Poster: "*Coupled gas-surface chemistry in the precursor of the early solar nebula*"
- **Rosina Workshop Meeting**, Bern, Schweiz, 2009, Vortrag: "*Chemistry in the early solar Nebula (SN)*"
- **HGF Topic 3000 Workshop Meeting**, Berlin, Deutschland, 2010, Vortrag: "*Current Status of the gas-grain model*"
- **3rd HGF Alliance Week**, Berlin, Deutschland, 2010, Vortrag: "*Current status of the gas-grain model*"
- **TU Braunschweig Oberseminar**, Braunschweig, Deutschland, 2010, Vortrag: "*Chemistry in the precursor of the solar nebula*"
- **HGF Midterm Review**, Berlin, Deutschland, 2011, Poster: "*Chemistry in the precursor of the solar nebula*"
- **11th EANA Workshop on Astrobiology**, Köln, Deutschland, 2011, Poster: "*Formation of water ice mixed with organic molecules in the solar nebula*"
- **HGF Topic 3000 Workshop Meeting**, Berlin, Deutschland, 2011, Vortrag: "*Origin and distribution of prebiotic molecules in the solar nebula*"
- **TU Braunschweig Oberseminar**, Braunschweig, Deutschland, 2011, Vortrag: "*Prebiotic molecules and H_2 in the precursor of the Solar Nebula*"
- **4th HGF Alliance Week**, Berlin, Deutschland, 2012, Vortrag: "*From simple atoms to complex molecules in a precursor of the solar nebula*"

Zusammenfassung

Die Entstehung des Lebens auf der Erde war ein erstaunliches und einmaliges Ereignis im Sonnensystem. Auch wenn wir noch weit davon entfernt sind, es umfassend zu begreifen, so sind doch einige Grundzüge bereits verstanden. Man ist sich beispielweise einig, dass es eine Gruppe von Molekülen gab, die zum Zeitpunkt der Entstehung frühester zellähnlicher Strukturen eine große Rolle gespielt haben. Diese präbiotischen Moleküle sind wiederum teilweise in einer Zeit gebildet worden, da die Erde als solche noch nicht existierte. In dieser Zeit war der Vorläufer des heutigen Sonnensystems eine Ansammlung von kaltem Gas mit geringer interner Dynamik. Wie sich in jüngerer Zeit gezeigt hat, ist die Entwicklung der Häufigkeiten chemischer Spezies in diesem Gas jedoch von weit größerer Dynamik und vermag es deshalb auch, präbiotische Moleküle zu bilden. Aufgrund dieser potentiell großen Bedeutung für die späteren Häufigkeiten präbiotischer Spezies, beschäftigt sich diese Arbeit auch mit Strukturen, die quasi-stationäre Wolkenkerne (QSCC) genannt werden. Die Gestalt eines QSCC, aus dem heraus das heutige Sonnensystem entstanden sein könnte, lässt sich vom heutigen Standpunkt aus noch nicht festlegen. Im in dieser Arbeit entwickelten Modell werden deshalb verschiedene Szenarien für einen QSCC betrachtet.

Bei allen simulierten Szenarien findet sich eine hohe Konzentration von Wasser H_2O , Methan CH_4 sowie Ammoniak NH_3 , während die Häufigkeit anderer präbiotischer Spezies wie beispielsweise H_2S weitaus variabler ist. Der größte Teil des Sauerstoffs bzw. Kohlenstoff wird in Wasser bzw. Methan gebunden sein, welches wiederum vorrangig in gebundener Form als Eis im QSCC vorliegt. Der mittlere Gehalt an präbiotischen Molekülen ist dabei einerseits von der Staubgrößenverteilung des QSCC abhängig und andererseits vom Grad der Abschirmung der einfallenden Strahlung, wobei besser abgeschirmte QSCC einen höheren mittleren Gehalt an präbiotischen Molekülen aufweisen.

Die Isotopenverhältnisse der präbiotischen Spezies und die Eiszusammensetzung machen es wahrscheinlich, dass die Entstehung der Kometen nicht im QSCC sondern in einer späteren Phase, d.h. im kollabierenden QSCC bzw. in der Scheibe stattfand. Die simulierten Ergebnisse bestätigen zudem, dass ein großer Teil der Konzentrationen und der Isotopenverhältnisse zeitabhängig ist. Somit könnte der Zeitpunkt des einsetzenden Kollapses des QSCC einen signifikanten Einfluss auf die Konzentrationen der präbiotischen Spezies sowie ihre Isotopenverhältnisse in späteren Phasen haben.

Abstract

A long time ago life emerged on earth. As perceived today this was a unique incident in the solar system and though we do understand little of the full process a coarse picture of it had been emerging lately. For instance, there is a general understanding that a particular class of molecules existed that were needed for early precursors of cells or cellular-like structures. These prebiotic molecules have been produced at least partly in times where the Earth did not yet exist. At that time, the potential precursor of the solar system consisted mostly of cold gas that showed little dynamic movement. This, however, is not true for the evolution of the abundances of species, which show far greater dynamics allowing even for the formation of prebiotic molecules. Naturally, this may have had a great influence on the abundances of prebiotic species in later times. It is for that reason that this work is concerned with the modelling of these structures, which will be termed quasi-stationary cloud cores (QSCC). From today's perspective one does not know what the QSCC was like that eventually became the solar system of today. Thus, various scenarios have been looked at in this work.

In all scenarios considered, a high abundance of water H_2O , methane CH_4 and ammonia NH_3 is found, while the amount of many other prebiotic species - especially H_2S - show a much greater abundance variation. Thus, the notably largest part of either oxygen and carbon will be incorporated in water and methane, respectively. These species in turn - like most of the prebiotic molecules - will be mainly present as ice on the grains in the QSCC. The average content of prebiotic molecules is mostly dependent on both the grain-size distribution used and the amount of shielding that is present. Better shielded QSCC show a larger average amount of prebiotic molecules than do less-shielded ones.

The isotopic composition as well as the ice composition of the grains in the QSCC are in only moderate agreement with the respective composition of observed comets. Thus, they suggest that comets have been built later in the collapsing QSCC or the disk phase. Furthermore, the simulated results confirm that many of the abundances and isotopic ratios of the considered species are time-dependent implying that the timing of the onset of collapse may be important for later stage abundances and isotopic ratios of these species, respectively.

Über diese Arbeit

Die Arbeit gliedert sich in drei grundlegende Abschnitte. Im einführenden Teil wird zunächst kurz die Entstehungsgeschichte eines potentiellen Vorläufers des heutigen Sonnensystems betrachtet. Anschließend wird beschrieben, welche aus der Literatur entnommenen Simulationsverfahren im Modell Eingang fanden. Im darauffolgenden Teil wird das Modell ausführlich beschrieben. Schließlich befasst sich der letzte Teil dieser Arbeit mit den Ergebnissen der Anwendungen des Modells.

Um diese Arbeit für den Leser vorteilhaft zu gestalten, wurde die Möglichkeit des Querlesens vereinfacht. Dazu sind die Literaturverweise und auch die Verweise auf andere Kapitel als Lesezeichen innerhalb des Dokuments verlinkt, ggf. erkennbar durch ein entsprechendes Verhalten des Mauszeigers. Dies gilt ebenso für alle Abkürzungen und einige der benutzen Formelsymbole und Konventionen, die im Glossar verzeichnet sind. Ist man einem Link gefolgt, der auf das Quellenverzeichnis oder den Glossar führt, so ist hinter dem entsprechenden Eintrag ein Link zu finden, der den Leser direkt zu der Seite zurückführt, von der aus der Link angeklickt wurde. Es ist oft der Fall, dass zusätzlich zum Ergebnis in Diagrammform auch der zeitliche Ablauf des Prozesses von Interesse ist. Aus diesem Grunde wurden an geeigneten Stellen Animationen im mp4-Format in das Dokument eingebunden. Diese sind anhand des Symbols einer angehängten Datei in den Fussnoten vorzufinden. Das Abspielen der Animation funktioniert für Benutzer des Acrobat-Readers problemlos, kann mit anderen PDF-Betrachtern aber unter Umständen nicht funktionieren. Für Benutzer eines Linux-Betriebssystems sollte neben dem AcrobatReader z.B. der Okular-Betrachter eine entsprechende Funktionalität besitzen.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	v
Tabellenverzeichnis	vii
Glossar	ix
I Einführung	1
1 Einleitung	3
2 Stand der Forschung	7
2.1 Einleitende Worte	7
2.2 Die Entstehung des Sonnensystems	8
2.2.1 Die Gasdichte des QSCC	8
2.2.2 Die Staumdichte des QSCC	9
2.2.3 Schlussfolgerungen	11
2.3 Chemische Kinetik	11
2.3.1 Einführung	11
2.3.2 Direkte Lösung der Mastergleichung	16
2.3.2.1 Analytischer lösbarer Testfall	16
2.3.2.2 Anwendung in einem kleinen Netzwerk	17
2.3.2.3 Anwendung im Hybriden Modell	20
2.3.3 Stochastische Simulation der Trajektorien	22
2.3.3.1 Der Stochastische Simulations-Algorithmus	22
2.3.3.2 Analytischer lösbarer Testfall	23
2.3.3.3 Zusammenfassung	24
2.3.4 Momenten- und Ratengleichungen	25
2.3.4.1 Mittelwerte der Spezies mithilfe der chemischen Mastergleichung	25
2.3.4.2 Momentengleichungen	25
2.3.4.3 Ratengleichungen	27

2.3.5	Aktuelle Modellansätze für die Entwicklung der Häufigkeiten chemischer Spezies	28
2.3.6	Schlussfolgerungen	29
II	Formulierung des Modells	35
3	Staub, Gas und Strahlung	37
3.1	Staub und Gas	37
3.2	Näherungen für das Gasprofil	38
3.2.1	Lösungen der Hydrostatischen Gleichungen	38
3.2.2	Das Plummer-Profil	40
3.3	Das sphärische Gitter	40
3.4	Strahlungstransport	42
3.4.1	Berechnung der Pfadintegrale	47
3.4.2	Interpolation der Gitterwerte	50
3.4.3	Partielle Pfad-Approximation	51
3.4.4	Vergleich der beiden Methoden anhand des Dämpfungsintegrals für die Staubbewegung	53
3.5	Die Größenverteilung der Staubkörner	55
3.5.1	Die MRN-Verteilung	56
3.5.2	Die BGS-Verteilung	56
3.5.3	Die Berechnung der Teilchenzahldichte	57
3.6	Das Temperaturmodell	58
3.6.1	Thermisches Modell des Staubs	59
3.6.2	Thermisches Modell des Gases	61
3.6.3	Kopplung von Gas und Staub	62
3.7	Die radialen Profile eines QSCCs	65
3.7.1	Die vollständigen dynamischen Gleichungen	65
3.7.2	Die Zustandsgleichung	66
3.7.3	Die sphärisch-symmetrische Lösung	68
3.7.4	Die einbettende Umgebung	69
3.8	Das selbst-konsistente Profil	71
3.9	Das selbst-konsistente Profil mit Randdruck	72
3.10	Bewegung des Staubs	74
3.10.1	Die allgemeine Bewegungsgleichung	74
3.10.2	Die Lösung der Bewegungsgleichung für ein Staubkorn	75
3.10.3	Der Algorithmus für die zeitliche Änderung der Staubbichte	78
3.10.4	Benchmark mit publiziertem Modell	81
3.11	Die Dynamik des Gases im quasi-statischen Grenzfall	83
3.12	Zusammenfassung	84

4	Die Entwicklung der Häufigkeiten chemischer Spezies	87
4.1	Numerische Vorbetrachtungen	87
4.2	Astrochemische Prozesse	92
4.2.1	Gasreaktionen	92
4.2.2	Staubreaktionen	93
4.2.3	Die Selbst-Abschirmung von H_2 und CO	95
4.3	Die Häufigkeit chemischer Spezies zu Simulationsbeginn	98
4.4	Die Konstruktion des Systems der ODEs	99
4.5	Isotopenchemie	102
4.6	Vergleich der simulierten Häufigkeiten mit Beobachtungen in Molekülwolken .	107
III	Anwendung des Modells und Schlussfolgerungen	109
5	Anwendungen des Modells	111
5.1	Simulationsszenarien	111
5.2	Untersuchte Spezies	113
6	Ergebnisse	117
6.1	Die quasi-stationäre Zeitentwicklung der Wolke	117
6.2	Häufigkeiten der präbiotischen Moleküle	118
6.2.1	Allgemeine Beobachtungen	118
6.2.2	Variabilität einzelner Spezies	120
6.2.3	Zusammensetzung des Eises	123
6.2.3.1	Eiszusammensetzung	123
6.2.3.2	Vergleich der Eiszusammensetzung mit kometarem Eis . . .	125
6.2.4	Isotopenverhältnisse der präbiotischen Spezies	128
7	Zusammenfassung	143
	Literaturverzeichnis	147

Abbildungsverzeichnis

1.1	Schematische Darstellung der Entstehungsgeschichte eines Sonnensystems . . .	5
2.1	Wechselwirkungszone für ein Atom/Molekül einer reagierenden Spezies in einer bimolekularen Reaktion	14
2.2	Vergleich zwischen der numerischen und der analytischen Lösung des Auffrie- rens von molekularem Wasserstoff	17
2.3	Populationen der Spezies auf dem Staubkorn und Produktionsraten der auf dem Staubkorn erzeugten gasförmigen Produkte	19
2.4	Schema für die Simulation der chemischen Kinetik mithilfe des Hybrid-Ansatzes	21
2.5	Resultat der Simulation des Hybriden Modells	31
2.6	Ergebnisse der Berechnung des linearen Testsystems mithilfe des implemen- tierten und parallelisierten stochastischen Simulationsalgorithmus	32
2.7	Mit Momentengleichung berechnete einfache Netzwerke	33
2.8	Schematische Darstellung der verschiedenen Lösungsmethoden der chemischen Kinetik	34
3.1	Radialer Verlauf der vorgestellten Näherungsprofile	39
3.2	Schematische Darstellung der Diskretisierung des QSCC	41
3.3	Ausgewählte optische Pfade für ein Staubkorn, das sich in radialer Entfernung r vom Kernzentrum befindet	44
3.4	Zur Parametrisierung eines optischen Pfades zwecks Berechnung des Pfadinte- grals	48
3.5	Relative Übereinstimmung der mithilfe der Interpolation ermittelten Lösung . .	51
3.6	Schematische Darstellung der Methode der partiellen Pfad-Approximation . . .	52
3.7	Relative Übereinstimmung der mithilfe der partiellen Pfad-Approximation er- mittelten Lösung	53
3.8	Vergleich der numerisch erhaltenen Resultate der Gleichung 3.31 mit dem theo- retischen Resultat	54
3.9	Qualitativ typischer Temperaturverlauf des Staubs	61
3.10	Vollständige Temperaturprofile unter Berücksichtigung der verschiedenen Staub- verteilungen	64
3.11	Berechnung der polytropischen Koeffizienten mithilfe eines gegebenen Gasprofils	67

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

3.12	Schematische Darstellung der Fixpunkt-Iteration	71
3.13	Verschiedene Iterationsstufen der selbst-konsistenten Iteration	72
3.14	Schematische Darstellung der Staubbewegung	79
3.15	Vergleich der Resultate des von Whitworth und Bate (2002) publizierten Modells mit dem in dieser Arbeit verwendeten Modell	83
3.16	Schematische Darstellung des Ablaufs der Simulation eines QSCC	86
4.1	Exzessiver numerischer Aufwand bei Anwendung eines expliziten Verfahrens auf ein System mit schnellen transienten Lösungen	89
4.2	Kompletter Verlust der Stabilität bei der numerischen Lösung mithilfe expliziter Verfahren	90
4.3	Bestimmung der näherungsweisen LU-Blockstruktur	92
4.4	Schematische Darstellung der möglichen Staubreaktionen	94
4.5	Radiale Abhängigkeit der Abschirmungsfaktoren für H_2 und CO	97
4.6	Vereinfachter Auszug der verwendeten Datenbank	100
4.7	Schematische Darstellung der Konstruktion der finalen Datenbank	105
5.1	Typische QSCC, welche die geforderte Masse und den geforderten Randdruck besitzen und in dieser Arbeit verwendet werden	115
6.1	Typische Änderungen von Parametern des QSCC nach einer Entwicklungszeit von 10 Myr	132
6.2	Variation der Häufigkeiten der in dieser Arbeit behandelten präbiotischen Spezies	133
6.3	Präbiotischer Index für alle in dieser Arbeit berechneten QSCC mit einem C/O Verhältnis von 1.2	134
6.4	Mittlerer präbiotischer Index zum Ende der Simulation für die 4 verschiedenen Klassen der QSCC	135
6.5	Suszeptibilität ausgewählter präbiotischer Spezies für die Änderung aller untersuchten Parameter	136
6.6	Einfluss der Dichtekonfiguration auf den Anteil der präbiotischen Eisspezies . .	137
6.7	Zeitlicher Verlauf der simulierten Flächendichten $\bar{N}_Y(t)$ für die häufigsten präbiotischen Eisspezies	138
6.8	Durchschnittliche Eiszusammensetzung für $t \geq 2$ Myrs	139
6.9	Vergleich der Eiszusammensetzung der berechneten QSCC mit der beobachteten Zusammensetzung in Kometen	140
6.10	Vergleich der Isotopen-Zusammensetzung des Eises in den simulierten QSCC mit der in den Kometen beobachteten Zusammensetzung	141

Tabellenverzeichnis

3.1	Übersicht über die in dieser Arbeit verwendeten Staubgrößenverteilungen mit einigen relevanten Parametern.	59
3.2	Absorptionseffizienz Q_ν eines Staubkorns für einige ausgewählte Frequenzen bzw. Wellenlängen λ	60
4.1	Konzentrationen der Spezies zu Beginn der Simulation	99
4.2	Energiebarrieren der Spezies, auf denen die Extrapolation für beliebige Isotope beruht.	106
5.1	Kennzahlen der QSCC, die in dieser Arbeit Verwendung finden	112
5.2	In dieser Arbeit untersuchte präbiotische Spezies	113
6.1	Suszeptibilität aller Spezies bei 10 Myr	121
6.2	Häufigkeiten der wichtigsten präbiotischen Eisspezies für $t \geq 2$ Myrs	125
6.3	Variabilität der Eiszusammensetzung aller QSCC für alle radialen Positionen und für $t \geq 2$ Myr, angegeben in Prozent bezogen auf Wassereis.	127
6.4	Variabilität des X/N -Isotopenverhältnisses aller QSCC für alle radialen Positionen und für $t \geq 2$ Myr sowie Suszeptibilität aller Spezies bei 10 Myr	129
6.5	Variabilität des D/H -Isotopenverhältnisses aller QSCC für alle radialen Positionen und für $t \geq 2$ Myr sowie Suszeptibilität aller Spezies bei 10 Myr	130

Glossar

- a_i** Reaktionsneigung der i -ten Reaktion. Sie ist implizit über die Wahrscheinlichkeit $P_i(\Delta t)$ definiert, dass die i -te Reaktion im Zeitintervall Δt eintritt. Es gilt der folgende Zusammenhang, der die Reaktionsneigung definiert: $P_i(\Delta t) = a_i \cdot \Delta t + o(\Delta t)$. 12, 87, 88, 91, 99
- k_b** Bezeichnet die Boltzmannsche Konstante. 8
- μ** Bezeichnet die mittlere Masse eines Teilchens in einer quasi-stationären Wolke. Dieser für die Berechnungen des Dichteprofiles bedeutsame Wert hängt mit der Masse eines Wasserstoff-Atoms m_H wie folgt zusammen: $\mu = 2.33 \cdot m_H$. 8
- CME** Chemische Mastergleichung: Bewegungsgleichung für die Wahrscheinlichkeit, dass sich N_j, N_i, \dots Teilchen der betrachteten Teilchensorten im System befinden. Mithilfe dieser Wahrscheinlichkeit lässt sich die mittlere Konzentration jeder Teilchensorte unmittelbar errechnen. 12, 13, 15–17, 19–23, 25–27, 29, 34, 87
- G_0** Skalierungsfaktor der Intensität des einfallenden Strahlungsfeldes. Ein Faktor $G_0 = 1$ entspricht der Intensität des in Zucconi et al. (2001) verwendeten Strahlungsfeldes. 85, 112
- $A_V^{(ext)}$** Parameter, der die Tiefe der Einbettung eines QSCC bestimmt. Für eine gegebene Randdichte n_g eines QSCC kann die Größe der sphärischen Einhüllenden dadurch bestimmt werden. Man fordert, dass die Säulendichte der Einhüllenden $N_g = \int_{\Gamma} n_g \cdot ds$ einem festgelegten Wert der optischen Extinktion A_V entspricht und definiert so implizit den Radius der Einhüllenden. 85, 112
- ISM** Das Medium, welches nicht zu einem Sternsystem zugehörig ist, so dass im Vergleich zu QSCCs abweichende physikalische Bedingungen vorliegen. In dieser Arbeit werde ich mich mit der Modellierung des ISM nicht beschäftigen sondern es parametrisch bzw. empirisch berücksichtigen. 98
- D** In dieser Arbeit verwendetes Kürzel für das schwere Isotop des Wasserstoffs (^2H). 21, 102, 105, 130
- X** In dieser Arbeit verwendetes Kürzel für das schwere Isotop des Stickstoffs (^{15}N). 102, 105, 129
- ISRF** Interstellares Strahlungsfeld: frequenzabhängige Verteilung des für die Modellierung erforderlichen Strahlungsfeldes. 37
- n_i** Teilchenzahldichte der Atome bzw. Moleküle der i -ten Spezies. Es gilt der Zusammenhang: $n_i = \frac{x_i}{V_R}$, wobei V_R das betrachtete Reaktionsvolumen bezeichnet. 27

- n_g** Teilchenzahldichte des Gases. Die in dieser Arbeit üblicherweise verwendete Einheit ist cm^{-3} . 62
- n_c** Teilchenzahldichte im Zentrum eines QSCC, d.h. $n_c = n_g(r = 0, t)$. 112
- n_d** Teilchenzahldichte des Staubs. Die in dieser Arbeit üblicherweise verwendete Einheit ist cm^{-3} . 62
- ν_j** Stöchiometrischer Vektor der gegebenen j -ten Reaktion. Es handelt sich um einen Vektor, welcher gleich der Differenz der Zahl der Atome/Moleküle der Spezies nach bzw. vor dem Eintreten der j -ten Reaktion ist. Für ein System aus zwei Spezies $S_1 = H$, $S_2 = H_2$ und der Reaktion $H + H \rightarrow H_2$ hätte der Vektor die folgende Gestalt: $\nu_1 = (-2, 1)^T$. 13, 101
- ODE** System gewöhnlicher gekoppelter Differentialgleichungen $F(t, y, \frac{dy}{dt}) = 0$. Die Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen sind in dieser Arbeit alle in expliziter Form gegeben: $\frac{dy}{dt} = G(t, y)$. Allen Systemen, die in dieser Arbeit Verwendung finden, ist gemein, dass sie aufwendige Lösungsverfahren unter Verwendung der Jacobi-Matrix $J_{ij} = \frac{dG_i}{dy_j}$ erfordern, falls keine analytischen Lösungen vorliegen. 34, 87
- τ_ν** Optische Tiefe bei der Frequenz ν . Die optische Tiefe ist wie folgt definiert: $\tau_\nu = \int_\Gamma \kappa_\nu \rho ds$. Darin bezeichnet Γ einen definierten Weg durch ein gegebenes Medium mit der Massendichte ρ und dem Massenabsorptionskoeffizienten κ_ν (Dyson und Williams, 1980). 43
- QSCC** Quasi-stationärer Wolkenkern: Gemeint ist eine Gaskonfiguration, die näherungsweise einem hydrostatischen Gleichgewicht entspricht. Typischerweise lässt sich die weiter vereinfachende Annahme vornehmen, dass eine sphärisch-symmetrische Gaskonfiguration vorliegt. 3–5, 8–10, 24, 27–29, 37, 38, 40, 42, 43, 50, 55, 59, 61–63, 65, 69–71, 74, 75, 78, 83–86, 96, 97, 107, 111, 112, 117–126, 128, 131–135, 138–141, 143–145
- R_c** Radius des QSCC. Aufgrund der quasi-stationären Änderung des Gasprofils ist dieser Wert schwach zeitabhängig. Typische Änderungen des Radius des QSCC betragen bei den für die Berechnungen zulässigen physikalischen Bedingungen nur $\approx 2 - 3 \%$. 48, 78, 84, 85, 112
- S_i** Allgemeine Bezeichnung für die i -te Spezies des betrachteten chemischen Systems. 11
- σ_N** Stochastisches Rauschen infolge einzelner Realisierungen eines Zufallsprozesses. Da σ_N invers von der Wurzel der Zahl an Zufallsprozessen abhängt, benötigt man eine sehr große Zahl von Realisierungen des Zufallsprozesses ($N \gtrsim 10^4$), um eine Konvergenz zu gewährleisten. 23
- MRN** Eine Staubgrößenverteilung $f(r_d)$, die in Pollack et al. (1985) auf der Grundlage der von Mathis et al. (1977) angegebenen Verteilung beschrieben ist. 55, 64
- BGS** Eine Staubgrößenverteilung $f(r_d)$, die prinzipiell aus mehreren verschiedenen Arten von Körnern besteht und in dieser Arbeit in die Form einer Ein-Teilchen-Verteilung gebracht wurde. Der Name rührt von der Verwendung des Modells Bare-Gr-S in Zubko et al. (2004) her. Die Gestalt der Verteilung ist bedeutend komplizierter als die der MRN-Verteilung (Zubko et al., 2004). 56, 64
- BES** Ein Profil für die Gasdichte $\rho_g(r)$, die sich als Lösung der hydrostatischen Gleichung unter der Annahme einer konstanten Gastemperatur berechnen lässt. 38, 39, 61

- SIS** Ein Profil für die Gasdichte $\rho_g(r)$, die sich als Lösung der hydrostatischen Gleichung durch Einsetzen des Ansatzes $\rho_g(r) = \frac{\alpha}{r^2}$ ergibt. Diese Lösung ist im Gegensatz zur BES nicht regulär. 39, 61
- PLS** Ein Profil für die Gasdichte $\rho_g(r)$, das empirisch aufgrund von Beobachtungen von Plummer (1911) eingeführt wurde. In dieser Arbeit ist ausschließlich das Profil gemeint, was sich durch die Wahl des Parameters $\eta = 2$ (vgl. ggf. Arreaga-García et al. (2007)) ergibt. 39, 40
- SSA** Stochastischer Simulations-Algorithmus: Methode zur Lösung der Gleichungen der chemischen Kinetik. Dabei werden stochastische Trajektorien der Häufigkeiten von Spezies berechnet. Die berechneten Trajektorien erlauben die Berechnung beliebiger Momente und damit prinzipiell die komplette Lösung des Problems der chemischen Kinetik. 22–24, 32, 34
- T_g Bezeichnet die Temperatur des Gases. Diese ist in den QSCC eine radial abhängige Größe. 8, 38
- T_d Bezeichnet die Temperatur des Staubs. Diese ist in den QSCC eine radial abhängige Größe. 60
- V_R Reaktionsvolumen, in welchem die Berechnung der chemischen Kinetik durchgeführt wird. Der thermodynamische Grenzfall, in dem die verschiedenen Simulationen der chemischen Kinetik zusammenfallen, entspricht dem Grenzübergang: $\forall i : x_i \rightarrow \infty, V_R \rightarrow \infty$ mit der zusätzlichen Forderung, dass $n_i = \frac{x_i}{V_R} = \text{const.}$ 27
- x_i Absolute Zahl an Atomen bzw. Molekülen der i -ten Spezies. 12
- ρ_c Bezeichnet die Dichte des Gases im Zentrum des auf der Grundlage des Hydrostatischen Gleichgewichts errechneten Gasprofils, d.h. $\rho_c = \rho_g(r = 0)$. 9, 85
- T_c Bezeichnet die Temperatur des Gases im Zentrum des auf der Grundlage des Hydrostatischen Gleichgewichts errechneten Gasprofils, d.h. $T_c = T_g(r = 0)$. 9

Teil I

Einführung

1

Einleitung

Die Entstehung des Sonnensystems ist ein komplizierter Prozess (Adams, 2010; Bergin und Tafalla, 2007; McKee und Ostriker, 2007; Natta, 2000; van Dishoeck und Blake, 1998), in welchem umfangreiche physikalische und chemische Wechselwirkungen die endgültige Gestalt des Sonnensystems beeinflussen. Durch theoretische Überlegungen, vor allen Dingen aber durch Beobachtungen, sind viele Grundzüge dieses Prozesses verstanden, und es ist möglich sich ein grundlegendes Bild von der Entstehung unseres Sonnensystems zu machen (Montmerle et al., 2006). Demnach beginnt die Geschichte der Entstehung des Sonnensystems in Riesenmolekülwolken - gewaltigen Zusammenballungen von Gas und Staub mit Ausdehnungen in der Größenordnung von einigen Parsec. Diese Zusammenballungen haben eine sehr geringe Gasdichte von höchstens einigen 100cm^{-3} und enthalten ihrerseits Bereiche größerer Dichte, die sogenannten Clumps, mit Ausdehnungen im Bereich einiger Zehntel Parsec (Bergin und Tafalla, 2007; Schmalzl et al., 2010). Die Bereiche größter Dichte in den Clumps wiederum, mit Ausdehnungen im Bereich einiger hundertstel Parsec (vgl. Teilabbildung a der Abbildung 1.1) und Gasdichten $\gtrsim 10^4\text{cm}^{-3}$, sind die eigentlichen Geburtsstätten von Sonnensystemen (Bergin und Tafalla, 2007; Montmerle et al., 2006; van Dishoeck und Blake, 1998). Diese Objekte sind jünger als die mit ihnen assoziierten Riesenmolekülwolken mit einem typischen Alter von ~ 30 Millionen Jahren (Murray, 2011) wobei in dieser Arbeit von einer Lebensdauer von 10 Millionen Jahren ausgegangen werden wird (Roberts und Herbst, 2002). Gegenüber den Riesenmolekülwolken, in denen sie beheimatet sind, weisen sie geringe Geschwindigkeiten und relative hohe Dichten auf (Bergin und Tafalla, 2007), und es ist deshalb möglich, diese Strukturen als quasi-stationär anzusehen (Burkert und Alves, 2009; Natta, 2000; Sterzik et al., 2003). Sie können aus diesem Grunde mit den Gleichungen der Hydrostatik beschrieben werden (Bonnor, 1956; Galli et al., 2002). Beobachtungen an Wolkenkernen stützen diese Methode der Beschreibung, da die Wolkenkerne sich im virialen Gleichgewicht befinden (Crutcher, 1999), oder deren radiale Struktur in dieser Weise gut approximiert werden kann (siehe z.B. Burkert und Alves, 2009). Diese Beobachtungen machen auch die Bezeichnung dieser Strukturen als quasi-stationäre Kerne (QSCC) verständlich.

1. EINLEITUNG

Viele QSCC werden durch externe Störungen (Natta, 2000; van Dishoeck und Blake, 1998) oder durch ihre instabile Dichtekongfiguration (Galli et al., 2002) letztlich kollabieren und beginnen durch zentrale Gasverdichtung einen Protostern zu formen (McKee und Ostriker, 2007; van Dishoeck und Blake, 1998). Durch weitere Verdichtung und aufgrund der Erhaltung des Drehimpulses entsteht aus diesem Vorläufer eine voll ausgebildete Scheibe (Adams, 2010; Bergin und Tafalla, 2007; McKee und Ostriker, 2007; Tscharnuter et al., 2009; van Dishoeck und Blake, 1998). In dieser Scheibe befinden sich größere Fragmente, welche durch Koagulation und gravitative Wechselwirkung untereinander sukzessive größere Fragmente, Planetesimale und letztlich Planeten bilden (Blum und Wurm, 2008; Montmerle et al., 2006; Walsh und Morbidelli, 2011). Abgesehen von auch heute noch vorhandenen dynamischen Prozessen auf planetarer Skala, entspricht dies auch der Gestalt des heutigen Sonnensystems.

Der Prozess als ganzes ist sehr kompliziert, und diese Arbeit wird sich auch nur mit einem Teilaspekt dieses Prozesses beschäftigen. Dies ist die chemische Geschichte eines QSCC, aus dem heraus das heutige Sonnensystem entstanden sein könnte. Das ist insbesondere deshalb von großem Interesse, da auf unserem Heimatplaneten etwas aus heutiger Sicht einmaliges geschah, indem die Entstehung von Leben möglich wurde. Die Details der Prozesse, welche zur Entstehung von Leben geführt haben, sind dabei noch unverstanden (Bada, 2004; Brack, 2005; Oró, 1995; Pascal et al., 2006). Aufgrund der molekularen Struktur des heutigen Lebens gibt es jedoch eine Klasse von Molekülen - die sogenannten präbiotischen Moleküle - die aus heutiger Sicht in diesem Prozess involviert gewesen sein müssen (Oró, 1995, 2000; Raulin et al., 2005). Diese Moleküle sind ihrerseits aus einfacheren Molekülen entstanden. In den letzten Jahren ist man durch Beobachtungen (siehe bspw. Bergman et al., 2011; Jørgensen et al., 2012; Sakai et al., 2008; Thaddeus, 2006) zu dem Schluss gekommen, dass ihre Entstehung bereits teilweise in den frühesten Vorläuferstufen des Sonnensystems - den QSCC - begonnen haben könnte, was auch durch theoretische Untersuchungen (Kupper et al., 2012; Tornow et al., 2010, 2005) gestützt wird. In welchem Umfang dabei die verschiedenen präbiotischen Moleküle gebildet werden können, ist von der physikalischen Gestalt der Vorläuferstadien abhängig (Herbst und van Dishoeck, 2009; van Dishoeck und Blake, 1998). Da diese wie oben beschrieben sequentiell aufeinander folgen, wird die chemische Zusammensetzung des entstandenen Sonnensystems von dem Vorläufer-QSCC beeinflusst werden. Es ist deshalb wichtig, sich mit der chemischen Entwicklung eines solchen QSCC bzw. seinem Gehalt an einigen wesentlichen präbiotischen Molekülen auseinanderzusetzen, was im folgenden geschehen wird.

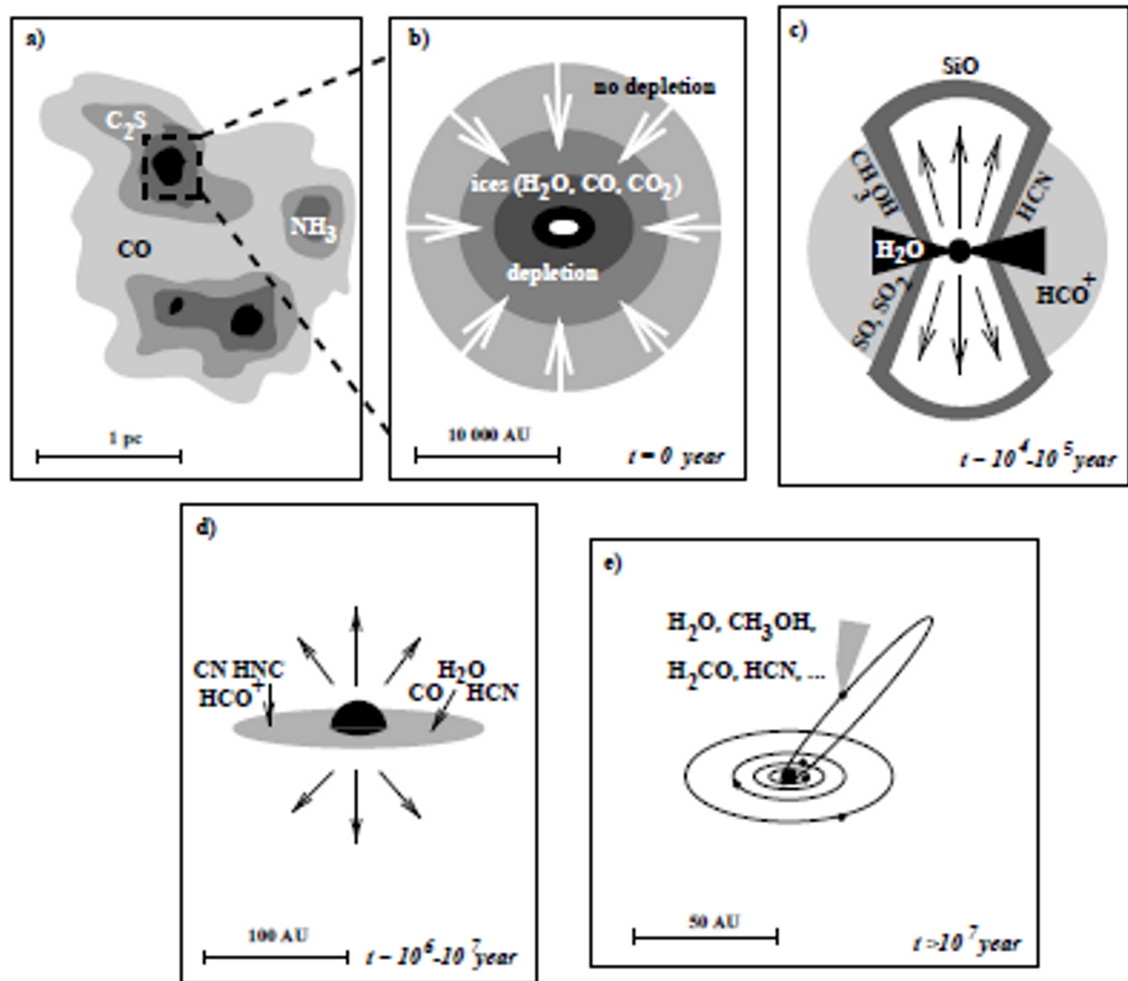


Abbildung 1.1: Schematische Darstellung der Entstehungsgeschichte eines Sonnensystems - Die modifizierte Abbildung von van Dishoeck und Blake (1998) skizziert die Entstehungsgeschichte eines Sonnensystems. In Teil a) ist eine Riesenmolekülwolke veranschaulicht. Sie enthält einige lokale Verdichtungen, die für diese Arbeit relevanten Quasi-Stationären Kernen QSCC, welche schematisch in Abbildung b) dargestellt sind. Ausgelöst durch ein äußeres Ereignis, wie z.B. die Schockwelle einer naheliegenden Supernova oder durch interne Instabilität, kollabiert der Kern und bildet einen Protostern, der mit einem starken polaren Materiefluss assoziiert ist (Abbildung c)), bevor sich eine Scheibe ausbildet (Abbildung d)). Durch gravitative Wechselwirkung mit festen Fragmenten und Strahlungsdruck verschwindet das Gas, und ein Sonnensystem ist entstanden (Abbildung e)). Da viele chemische Prozesse in frühen Phasen (Abbildung b)-c)) mitunter weit vom thermodynamischen Gleichgewicht ablaufen, ist die Entstehungsgeschichte für das gebildete Sonnensystem von Bedeutung.

2

Stand der Forschung

2.1 Einleitende Worte

Bevor der gegenwärtige Stand der Forschung in diesem Kapitel erläutert wird, ist es wichtig, ein paar einleitende Worte über die Struktur dieses Kapitels zu verlieren. Wie in der vorhergehenden Einleitung beschrieben wurde, kommt es bei der Entstehung eines Sonnensystems zu verschiedenen charakteristischen Stadien. Von diesen in der Einleitung beschriebenen Phasen beschäftigt sich diese Arbeit mit der frühesten, der quasi-stationären Phase. Während dieser Phase durchläuft der quasi-stationäre Kern eine Entwicklung, in welcher sich die Häufigkeiten der chemischen Spezies ändern (Kupper et al., 2012; Semenov et al., 2010; Wakelam et al., 2006). Diese Änderungen implizieren streng genommen veränderte Wechselwirkungen der Spezies mit dem einfallenden Strahlungsfeld (Goldsmith, 2001) und haben somit Auswirkungen auf das thermische Profil, welches wiederum Änderungen der Gasdichte impliziert (Galli et al., 2002; Sipilä et al., 2011, 2010). Es ist von Vorteil, dass die Dichten sowohl des Gases als auch des Staubs gering genug sind, um diesen Effekt relativ klein zu halten. Es ist deswegen möglich, die beiden Teilaspekte der Modellierung - die Modellierung der Entwicklung der chemischen Spezies einerseits und die Modellierung der Entwicklung der Gas- und Staubbichten andererseits - getrennt zu betrachten. In diesem Sinne ist auch Kapitel 2 gegliedert worden. Aufgrund des gewählten Schwerpunktes dieser Arbeit steht die Betrachtung der chemischen Kinetik anstelle des physikalischen Modells im Vordergrund. Dementsprechend nimmt die Betrachtung der chemischen Kinetik im Kapitel 2 einen größeren Raum ein. Dabei wird in diesem Kapitel im Abschnitt 2.2 zuerst auf die gegenwärtig vorliegenden physikalischen Modelle für die quasi-stationäre Phase eingegangen werden, bevor das Modell für die chemische Kinetik betrachtet wird. Die chemische Kinetik, die Gegenstand der verbleibenden Abschnitte 2.3-2.3.5 sein wird, wird dabei weitaus ausführlicher behandelt. Somit wird besser verständlich, welche Modellansätze für diese Arbeit verwendet werden konnten und welche zu anspruchsvoll für die vorhandenen Ressourcen waren und deswegen nicht in hinreichender Güte umgesetzt werden konnten.

2.2 Die Entstehung des Sonnensystems

2.2.1 Die Gasdichte des QSCC

Wie in Kapitel 1 und im Abschnitt 2.1 geschildert, wird es in dieser Arbeit um einen quasi-stationären Kern (QSCC) gehen. Der physikalische Zustand dieses QSCC wird dabei je nach Masse und Einbettung des Kerns in die zugehörige Riesenmolekülwolke unterschiedlich sein (siehe z.B. Natta, 2000). Da es in dieser Arbeit um die Isotopenverhältnisse in einem QSCC gehen wird, der potentiell ein Vorläufer des heutigen Sonnensystems gewesen sein könnte, ist es wichtig, einen geeigneten Kern definieren zu können. Da sich vom heutigen Standpunkt aus nicht entscheiden lässt, welche Bedingungen zum Zeitpunkt der Entstehung des QSCC vorlagen (Montmerle et al., 2006), muss eine Annahme getroffen werden. Dabei existieren im wesentlichen zwei Möglichkeiten: Die Entstehungsregion könnte einer aktiveren turbulenten Region mit höherer Intensität der einfallenden Strahlung entsprechen oder einer weniger aktiven Region. In dieser Arbeit wird von einer weniger aktiven Region ausgegangen werden, wie sie für die masseärmeren Sternentstehungsregionen im Sternbild Taurus typisch ist (Montmerle et al., 2006). Die Annahme eines quasi-statischen Objektes, welches sich mindestens näherungsweise im virialen Gleichgewicht befindet, lässt sich durch Beobachtungen rechtfertigen (Crutcher, 1999). Die physikalische Struktur dieses quasi-stationären Kerns lässt sich somit mithilfe der Annahme eines hydrostatischen Gleichgewichts gut ermitteln (Aikawa et al., 2005; Boland und de Jong, 1984; Bonnor, 1956; Galli et al., 2002; Sipilä et al., 2011, 2010). Dabei ist es durchaus möglich, viele - aber nicht alle - Kerne als radial symmetrisch anzunehmen, da sich viele Beobachtungen auf diese Art gut beschreiben lassen (Bergin und Tafalla, 2007; Markwick et al., 2000; Pagani et al., 2004; Peng et al., 1998), zum Teil sogar bei explizit nicht radial-symmetrischen Strukturen (Burkert und Alves, 2009). Ausgehend von den hydrostatischen Gleichungen (Landau und Lifshitz, 1987) und unter Vernachlässigung der gravitativen Wechselwirkung des Staubs lassen sich somit zunächst die folgenden Grundgleichungen ermitteln:

$$0 = \rho_g \cdot \Phi - \nabla P \quad (2.1)$$

$$\nabla^2 \Phi = 4\pi G \rho_g \quad (2.2)$$

$$P = \rho_g \cdot \frac{k_b \cdot T_g}{\mu} = \rho_g \cdot c_s^2 \quad (2.3)$$

In diesen Gleichungen beschreibt ρ_g die Dichte des Gases, P den Druck, Φ das Gravitationspotential, G die Gravitationskonstante, k_b die Boltzmannsche Konstante, μ die mittlere Masse eines Teilchens der Gasphase sowie c_s die Schallgeschwindigkeit im Medium bei konstanter und vorgegebener Gastemperatur T_g , wobei ein Wert von $T_g = 10K$ ein typischer "kanonischer" Wert ist (Semenov et al., 2010). Die erste Gleichung ist dabei die stationäre Impulsgleichung, die zweite Gleichung stellt die Poisson-Gleichung für das Gravitationspotential dar, während die letzte Gleichung die Zustandsgleichung des Gases ist. Die Zustandsgleichung entspricht dabei der Gleichung des idealen Gases (Bonnor, 1956; Sipilä et al., 2011, 2010). Durch die radiale Symmetrie lässt sich das System der Gleichungen 2.1-2.3 in eine Differen-

tialgleichung zweiter Ordnung für die Gasdichte überführen. Die Annahme einer konstanten Gastemperatur führt dabei mithilfe zweier Variablentransformationen $\xi = f \cdot r$ (mit f als konstantem Faktor) und $\psi(\xi) = F(\rho_g(\xi))$ auf die folgende Lane-Emden Gleichung (Bonnor, 1956; Burkert und Alves, 2009):

$$\frac{1}{\xi^2} \cdot \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \cdot \frac{d\psi}{d\xi} \right) = e^{-\psi} \quad (2.4)$$

Die Lösung dieser Lane-Emden Gleichung (aufgrund der Randbedingung $\frac{d\psi}{d\xi}(\xi = 0) = 0$ nur schwach singulär) ist bereits lange bekannt (Emden, 1907) und lässt sich relativ leicht mithilfe der numerischen Lösung (wie z.B. in Hairer und Wanner, 2010) der Differentialgleichung 2.4 ermitteln. Aus dieser Lösung lässt sich mithilfe der Beziehung $\rho_g(\xi) = \rho_c \cdot \exp(-\psi(\xi))$ die Gasdichte des QSCC leicht ermitteln, wobei ρ_c die Dichte des Gases im Zentrum bezeichnet. Beobachtungen zeigen, dass Kerne allerdings ein Temperaturprofil besitzen und nicht isotherm sind (Crapsi et al., 2007), so dass realistischere Modelle ein solches Temperaturprofil besitzen müssen. Das Temperaturmodell basiert dabei einerseits auf einem Strahlungsgleichgewicht für das Staubkorn, während andererseits das Gas durch die kosmische Strahlung geheizt wird und durch Emission von Strahlung Energie verliert (Evans et al., 2001; Goldsmith, 2001; Zucconi et al., 2001). Kompliziert wird das Modell dadurch, dass Staub und Gas durch thermische Stöße gekoppelt sind, was zu einem System nicht-linearer Gleichungen führt, die zu lösen sind (Goldsmith, 2001). Dieser Punkt wird ausführlich im Abschnitt 3.6 betrachtet werden. Mithilfe eines derart gewonnenen Temperaturprofils $T_g(r)$ ist es möglich, ein konsistentes Dichteprofil zu konstruieren. Die Gleichung für das Dichteprofil $\rho_g(r)$ bzw. $\psi(\xi)$ lässt sich dabei analog aus den hydrostatischen Gleichungen konstruieren. Die entstehende Gleichung hat aufgrund des Temperaturprofils $T_g(r)$ bzw. $\tau(\xi) = T_g(\xi)/T_c$ die folgende Gestalt, wobei T_c die Temperatur im Zentrum des QSCC ist:

$$\frac{1}{\xi^2} \cdot \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \tau \cdot \frac{d\psi}{d\xi} \right) = \frac{1}{\tau} \cdot e^{-\psi} \quad (2.5)$$

Mithilfe der modifizierten Transformationsformeln $\rho_g(\xi) = (\rho_c/\tau(\xi)) \cdot \exp(-\psi(\xi))$ und des anderweitig bestimmten Temperaturprofils lässt sich somit die Gasdichte ermitteln (Sipilä et al., 2011, 2010). Da die Lösung der nichtlinearen Gleichung für das Temperaturprofil des Staubs und des Gases sehr aufwendig ist, wird üblicherweise eine Vereinfachung vorgenommen. Dazu wird entweder die Gastemperatur gleich der des Staubs gesetzt (Sipilä et al., 2011, 2010), oder der Gas-Staub-Kopplungsterm in der nichtlinearen Gleichung für den Staub vernachlässigt (Galli et al., 2002). Beides vereinfacht die vollständige Lösung des Systems der Gleichungen erheblich. Die erste Approximation ist dabei für das Innere des QSCC durchaus zulässig, während die zweite Approximation für die Randbereiche des QSCC aufgrund der dort vorliegenden geringeren Dichten verwendet werden darf.

2.2.2 Die Staubdichte des QSCC

Ein gegebenes Gasprofil impliziert ein Staubprofil über das Massenverhältnis von Gas zu Staub. Dieses ist aufgrund der Größe der beteiligten Staubkörner und der dadurch implizierten Bewe-

2. STAND DER FORSCHUNG

gung (Whitworth und Bate, 2002) zwar durchaus variabel, darf aber zumindest zum Zeitpunkt der Entstehung eines QSCC als konstant betrachtet werden (Pollack et al., 1985; Zubko et al., 2004; Zucconi et al., 2001). Obwohl der genaue Wert des Massenverhältnisses von Gas zu Staub durchaus zwischen verschiedenen Quellen abweicht (Pollack et al., 1985; Zubko et al., 2004) besteht Einigkeit darüber, dass es etwa einem Hundertstel entspricht, $\rho_d/\rho_g \approx 10^{-2}$. Daher ist die Verwendung der hydrostatischen Gleichungen unter Vernachlässigung der Staubphase zulässig. Ein vorgegebenes Massenverhältnis impliziert jedoch keineswegs ein festes Verhältnis der *Teilchenzahldichten*, die für die Veränderung der Häufigkeiten der chemischen Spezies im Kern eine große Bedeutung besitzen (Kupper et al., 2012; Semenov et al., 2010). Die Teilchenzahldichte der Staubkörner - und damit auch die katalytisch für die Spezies wirksame Oberfläche - hängt entscheidend von der Größenverteilung der Staubkörner ab und wird Gegenstand des Kapitels 3.5 sein. Die bei der Berechnung der Veränderung der Häufigkeiten der chemischen Spezies übliche Annahme von Körnern mit einer festen Größe von $r_d \approx 10^{-1} \mu m$ (Semenov et al., 2010; Wakelam et al., 2006) steht dabei durchaus im Widerspruch zur weit komplizierteren Größenverteilung der Staubkörner (Pollack et al., 1985; Zubko et al., 2004).

Aufgrund des Strahlungsdrucks kann der Staub sich bewegen (Whitworth und Bate, 2002), was eine Vergrößerung der optischen Tiefe impliziert. Damit gehen auch Veränderungen des Strahlungsgleichgewichts im QSCC und der Gas- und Staubtemperaturen einher (Evans et al., 2001; Goldsmith, 2001; Zucconi et al., 2001). Die Berechnungen von Whitworth und Bate (2002) zeigen, dass der Effekt der Staubbewegung durchaus beträchtlich sein kann, vernachlässigen aber den Effekt der dadurch veränderlichen optische Tiefe im QSCC. Das Modell der Staubbewegung basiert auf dem folgenden System von Gleichungen für die Geschwindigkeit v_d eines Staubkorns der Größe r_d in einem QSCC:

$$\frac{dv_d}{dt} = d(r) \cdot F_0 - \alpha(r_d) \cdot v_d (v_d + \beta) \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial \rho_d}{\partial t} = -\nabla (\rho_d \cdot v_d) \quad (2.7)$$

$$d(r) = \int_{-1}^1 \chi e^{-\tau(r,\chi)} d\chi \quad (2.8)$$

Dabei entspricht r der Distanz zum Zentrum des QSCC, der Term $0 \leq d(r) \leq 1$ beschreibt die Dämpfung der einfallenden Strahlung im Kern aufgrund des vorhandenen Dichteprofiles des Staubs $\rho_d(r)$, F_0 die durch Einwirkung der Strahlung wirkende Kraft, sowie $\alpha(r_d)$ und β geeignete Reibungskoeffizienten. Aufgrund des Faktors $d(r)$ handelt es sich um eine Integrodifferentialgleichung für die Staubbichte bzw. im Falle einer diskretisierten Staubverteilung um ein System von Integrodifferentialgleichungen. Mittels der Annahme von Staubkörnern mit einer festen Größe von $r_d = 10^{-1} \mu m$ und mit der Annahme eines *nur* initial berechneten Dämpfungsfaktors $d(r)$ gelingt es Whitworth und Bate (2002), das System der Gleichungen 2.6-2.8 zu lösen. Dieses Gleichungssystem wird in dieser Arbeit als Grundlage für die selbst-konsistente Behandlung der Staubbewegung benutzt und muss dann natürlich numerisch gelöst werden. Die

numerische Lösung der Gleichung ist dabei Gegenstand des Abschnittes 3.10.

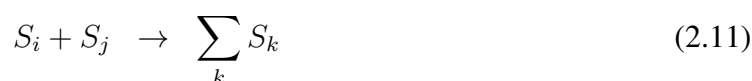
2.2.3 Schlussfolgerungen

Quasi-stationäre Kerne als Vorläufer von Sternsystemen mit voll ausgebildeter Scheibe (Bergin und Tafalla, 2007; Montmerle et al., 2006; van Dishoeck und Blake, 1998) lassen sich theoretisch gut mithilfe der Annahme eines hydrostatischen Gleichgewichtes beschreiben (Bacmann et al., 2000; Burkert und Alves, 2009). Dabei sind die Bemühungen um ein selbst-konsistentes Dichteprofil, d.h. ein Dichteprofil, welches genau das Temperaturprofil impliziert, mit welchem es auch berechnet wurde, relativ weit fortgeschritten (Galli et al., 2002; Sipilä et al., 2011, 2010). Die Arbeit von Galli et al. (2002) bzw. Sipilä et al. (2011) wird dahingehend erweitert, dass den Berechnungen der Temperaturprofile (Goldsmith, 2001; Zucconi et al., 2001) ein vollständiges nichtlineares System, ebenso wie verschiedene Modelle für die Größenverteilung des Staubs, zugrunde gelegt werden (Pollack et al., 1985; Zubko et al., 2004). Zudem wird ein parametrischer Ansatz benutzt, um die Effekte einer erhöhten Strahlungsintensität auf die physikalische Struktur - und einhergehend auf die Entwicklung der Häufigkeiten der in ihm befindlichen Spezies - untersuchen zu können. Dies bedeutet insbesondere, dass zumindest in einer parametrischen Approximation der äußere Druck berücksichtigt wird, der je nach Intensität des Strahlungsfeldes variabel ist (Galli et al., 2002; Zucconi et al., 2001). Eine genauere Betrachtung dieser Aspekte wird Gegenstand des Kapitels 3 sein.

2.3 Chemische Kinetik

2.3.1 Einführung

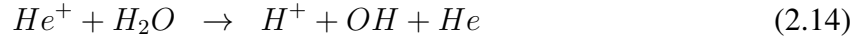
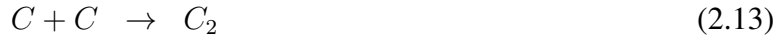
Während der Entstehung des Sonnensystems kam es zu zahlreichen chemischen Umwandlungen und Wechselwirkungen von Spezies, welche typischerweise fern des thermodynamischen Gleichgewichts abliefen (Herbst, 2001; Herbst et al., 2005; Herbst und Klemperer, 1973; Herbst und van Dishoeck, 2009; Herbst und Wakelam, 2007; Smith, 2008; van Dishoeck und Blake, 1998). Um diese Prozesse beschreiben zu können, bedarf es der chemischen Kinetik. Es existieren dabei die folgenden grundlegenden Reaktionstypen in der chemischen Kinetik (Gillespie, 1992):



Hierbei ist die erste Reaktion 2.9 eine monomolekulare Reaktion, bei der eine chemische Spezies S_i durch ihren Zerfall eine andere chemische Spezies bildet. Die Reaktion 2.10 ist eine

2. STAND DER FORSCHUNG

bimolekulare Reaktion zwischen *gleichen* Reaktanten während die Reaktion 2.11 eine bimolekulare Reaktion zwischen verschiedenen Reaktanten ist. Beispiele für diese Reaktionen (McElroy et al., 2013; Semenov et al., 2010; Woodall et al., 2007) sind der strahlungsgetriebene Zerfall des molekularen Wasserstoffs, die Bildung von molekularem Kohlenstoff und eine der radikalbildenden Reaktionen des Wassers:



Das Grundproblem der chemischen Kinetik ist gelöst, wenn die Wahrscheinlichkeit $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$ bekannt ist. Dieser Ausdruck entspricht der Wahrscheinlichkeit, einen gegebenen Vektor von Häufigkeiten von Spezies \mathbf{x} zum Zeitpunkt t vorliegen zu haben, wenn initial ein Vektor \mathbf{x}_0 zum Zeitpunkt t_0 vorgelegen hat. Die Bewegungsgleichung für diese Wahrscheinlichkeit, die chemische Mastergleichung (CME), lässt sich mithilfe der Reaktionsneigungen a_i einer jeden im System vorhandenen Reaktion ermitteln. Die Reaktionsneigung ist für jede der im chemischen System vorhandenen Reaktionen indirekt wie folgt definiert (Gillespie, 2007):

$$P_i(\Delta t) = a_i(\mathbf{x}) \cdot \Delta t + o(\Delta t) \quad (2.15)$$

Darin bezeichnet $P_i(\Delta t)$ die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten der i -ten Reaktion im Zeitintervall $[t, t + \Delta t]$, während $o(\Delta t)$ Terme höherer Ordnung in Δt bezeichnet, d.h. $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{o(\Delta t)}{\Delta t} = 0$. Sind die Wechselwirkungsquerschnitte einzelner Reaktionen bekannt (siehe bspw. Alonso et al., 2008; Clary, 1990; Hu und Yang, 2008; Pilling, 1996; Pilling und Robertson, 2003; Tse, 2002; Weinan und Vanden-Eijnden, 2010) lassen sich die Reaktionsneigungen der Reaktionen (2.9-2.11) leicht ermitteln.

Die Reaktionsneigung der monoatomaren Reaktion 2.9 erfordert keinen Stoßprozess, so dass die Wahrscheinlichkeit des Eintretens der Reaktion - für ein hinreichend kleines Zeitintervall $[t, t + \Delta t]$ - gleich dem Produkt der Wahrscheinlichkeit des Eintretens eines solchen Zerfalls und der Zahl der Moleküle bzw. Atome der monomolekularen Reaktion ist. Unter Berücksichtigung der Definition der Reaktionsneigung 2.15 ergibt sich der folgende Ausdruck für die Reaktionsneigung a_i einer monomolekularen Reaktion:

$$a_i = k_i \cdot x_i \quad (2.16)$$

Hierbei bezeichnet x_i die absolute Anzahl der Atome der i -ten Spezies und k_i eine Konstante, die die Wechselwirkungswahrscheinlichkeit der jeweiligen Spezies mit dem Strahlungsfeld beschreibt. Die Reaktionsneigung a_i einer bimolekularen Reaktion (2.10-2.11) lässt sich mithilfe der kinetischen Theorie berechnen (Gillespie, 1992; Liboff, 2003). Befinden sich x_a Atome der einen Spezies und x_b Atome der anderen Spezies in einem gegebenen Reaktionsvolumen, so lässt sich die Zahl der Kollisionen im Zeitintervall $[t, t + dt]$ mit dem folgenden Ausdruck

beschreiben:

$$N_{tot} \propto x_a \cdot x_b \quad (2.17)$$

Darin sind die Proportionalitätskonstanten durch die kinetische Theorie berechenbar (Gillespie, 1992; Liboff, 2003). Mit diesem Ausdruck lässt sich die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten einer bimolekularen Reaktion im Zeitintervall $[t, t + \Delta t]$ wie folgt angeben:

$$P_i(\Delta t) = N_{tot} \cdot \Delta t + o(\Delta t) \quad (2.18)$$

Der Vergleich der Gleichungen 2.15 und 2.18 ergibt somit die folgende Gestalt der Reaktionsneigung für eine bimolekulare Reaktion:

$$a_{b1} = k_{b1} \cdot x_i \cdot (x_i - 1) \quad (2.19)$$

$$a_{b2} = k_{b2} \cdot x_i \cdot x_j \quad (2.20)$$

Hierbei bezeichnet a_{b1} die Reaktionsneigung einer bimolekularen Reaktion mit *identischen* Reaktanten, in welchem nur $x_b = x_a - 1$ Stoßpartner zur Verfügung stehen (vgl. Gleichung 2.17), und a_{b2} die Reaktionsneigung einer bimolekularen Reaktion mit zwei verschiedenen Reaktanten. k_{b1}, k_{b2} sind die entsprechenden Proportionalitätskonstanten der Gleichung 2.17.

Mithilfe der so erhaltenen Ausdrücke für die Reaktionsneigungen lässt sich die chemische Mastergleichung CME ableiten. Dazu benutzt man die Wahrscheinlichkeit $P_j(\Delta t)$, Gleichung 2.15, für das Eintreten der j -ten Reaktion im Zeitfenster $[t, t + \Delta t]$. Da die Entwicklung eines Systems von Spezies eine Sequenz von mikrophysikalischen Reaktionsereignissen darstellt, lässt sich darüber die chemische Mastergleichung ableiten. Ein System ist dabei für einen endlichen Zeitabschnitt im Zustand \mathbf{x} , bevor es nach einer stochastischen Zeitspanne τ plötzlich durch Eintreten der j -ten Reaktion in den Zustand $\mathbf{x} + \boldsymbol{\nu}_j$ übergeht. Dabei ist $\boldsymbol{\nu}_j$ der stöchiometrische Vektor der j -ten Reaktion, welcher angibt, wie sich die Zahl der Atome bzw. Moleküle jeder im System enthaltenen Spezies nach der eingetretenen j -ten Reaktion geändert hat.

Zur Ableitung der CME definiert man zunächst mit A das Ereignis, zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ im Zustand \mathbf{x} zu sein, mit B_0 das Ereignis, zum Zeitpunkt t im Zustand \mathbf{x} gewesen zu sein, und mit B_j das Ereignis, zum Zeitpunkt t in dem Zustand $\mathbf{x} - \boldsymbol{\nu}_j$ gewesen zu sein. Dann sind alle Ereignisse $B_j, j = 0, \dots, M$ gegenseitig ausschließend, und man kann mit dem Gesetz der totalen Wahrscheinlichkeit (Ghahramani, 2005) den folgenden Ausdruck ableiten:

$$P(A) = P(A|B_0) \cdot P(B_0) + \sum_j P(A|B_j) \cdot P(B_j) \quad (2.21)$$

Dabei entspricht $P(A|B_0)$ der Wahrscheinlichkeit, dass keine Reaktion im Zeitintervall $t + \Delta t$ eingetreten ist. Der Ausdruck $P(A|B_j)$ bezeichnet die Wahrscheinlichkeit, dass die j -te Reaktion eingetreten ist, und entspricht somit dem bereits bekannten Ausdruck P_j . Die Wahrschein-

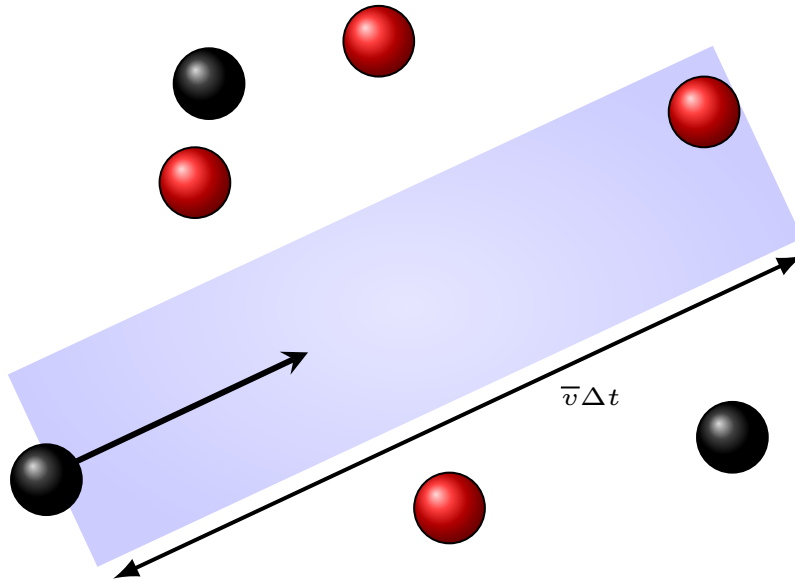


Abbildung 2.1: Wechselwirkungszone für ein Atom/Molekül einer reagierenden Spezies in einer bimolekularen Reaktion - Die Abbildung zeigt schematisch den Bereich, in welchem ein Atom/Molekül in einem hinreichend kleinem Zeitintervall $[t, t + \Delta t]$ in eine Wechselwirkung mit einem Atom/Molekül der anderen an der Reaktion teilnehmenden Spezies kommt. Mithilfe des Reaktionsvolumens lässt sich die Gestalt der Reaktionsneigungen für eine bimolekulare Reaktion unmittelbar errechnen (Gleichungen 2.19, 2.20).

lichkeit, dass keine Reaktion im Zeitintervall $t + \Delta t$ eintritt, lässt sich dann leicht angeben:

$$P(A|B_0) = 1 - \sum_j P_j \quad (2.22)$$

Setzt man nun den Ausdruck für die Reaktionswahrscheinlichkeit, Gleichung 2.15, sowie die Ausdrücke für $P(A|B_j)$ und $P(A|B_0)$ (Gleichung 2.22), in Gleichung 2.21 ein, so gelangt man zu folgendem Ausdruck für die Wahrscheinlichkeit $P(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{x}_0, t_0) = P(A)$ (Gillespie, 1992, 2007; McQuarrie, 1967):

$$\begin{aligned} P(\mathbf{x}, t + \Delta t | \mathbf{x}_0, t_0) = & P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \cdot \left(1 - \sum_{j=1}^M a_j(\mathbf{x}) \Delta t + o(\Delta t) \right) \\ & + \sum_j^M P(\mathbf{x} - \boldsymbol{\nu}_j, t | \mathbf{x}_0, t_0) \cdot (a_j(\mathbf{x} - \boldsymbol{\nu}_j) \Delta t + o(\Delta t)) \end{aligned} \quad (2.23)$$

Sortiert man in Gleichung 2.23 die Terme und vollzieht den Grenzübergang $\Delta t \rightarrow 0$, erhält man die Mastergleichung (CME):

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)}{\partial t} = \sum_{j=1}^M (a_j(\mathbf{x} - \boldsymbol{\nu}_j) \cdot P(\mathbf{x} - \boldsymbol{\nu}_j, t | \mathbf{x}_0, t_0) - a_j(\mathbf{x}) \cdot P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)) \quad (2.24)$$

Die Lösung der Gleichung 2.24 stellt die Lösung des Grundproblems der chemischen Kinetik dar, da sich mit dieser Lösung die Entwicklung der Häufigkeiten für die Spezies im System beschreiben lässt. Es handelt sich um ein System aus gekoppelten Differentialgleichungen, wobei man für jede auftretende Kombination von Häufigkeiten verschiedener Spezies je eine Differentialgleichung erhält. Diese Tatsache macht eine Lösung der Gleichung außerordentlich schwer. Es gibt jedoch verschiedene Lösungsansätze für die Gleichung, die separat in den nachfolgenden Abschnitten behandelt werden. Diese Lösungsansätze reichen von der direkten Lösung 2.3.2 über die stochastische Simulation einzelner Trajektorien 2.3.3 bis hin zu Näherungsmethoden 2.3.4.

2. STAND DER FORSCHUNG

2.3.2 Direkte Lösung der Mastergleichung

2.3.2.1 Analytischer lösbarer Testfall

Es ist naheliegend, die CME als System gewöhnlicher Differentialgleichungen direkt mit den bekannten Lösungsmethoden (Brown und Hindmarsh, 1989; Brown et al., 1989; Cash und Gladwell, 1992) zu lösen. Die Ausdrücke $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$ müssen als Wahrscheinlichkeiten dabei die folgenden zwei Bedingungen erfüllen (Ghahramani, 2005):

$$\forall \mathbf{x} \Rightarrow P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \geq 0 \quad (2.25)$$

$$\sum_{\forall \mathbf{x}} P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) = 1 \quad (2.26)$$

Bei der direkten numerischen Lösung der Gleichung 2.24 müssen diese zwei Bedingungen hinreichend genau erfüllt sein. Gilt dies für die Bedingung 2.25 nicht, so entsteht typischerweise eine singuläre Lösung $\exists \mathbf{x} \rightarrow P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \gg 1$. Wird die zweite Gleichung 2.26 nicht hinreichend genau erfüllt führt dies typischerweise zu einem Verschwinden der Wahrscheinlichkeiten $\forall \mathbf{x} \rightarrow P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \approx 0$. Aus diesem Grunde und aufgrund der vorhandenen verschiedenen Zeitskalen kann das System der gewöhnlichen Differentialgleichungen, Gleichung 2.24, nur mit aufwendigen numerischen Verfahren gelöst werden (Hairer und Wanner, 2010; Nejad, 2005). Zum Testen der Lösungsverfahren für die chemische Mastergleichung CME bietet es sich an, ein exakt lösbares System zu verwenden. Dieser Fall liegt beispielsweise vor, wenn das Aufrieren von molekularem Wasserstoff der *einzige* chemischen Prozess ist:



Mit der bekannten Ratenkonstante k lautet die Wahrscheinlichkeit, x Teilchen des molekularen Wasserstoffs H_2 zum Zeitpunkt t vorliegen zu haben (McQuarrie, 1967):

$$P(x, t | x_0, t_0) = \binom{x_0}{x} \cdot e^{-xkt} \cdot (1 - e^{-kt})^{(x_0-x)} \quad (2.28)$$

Dabei bezeichnet x_0 wie zuvor die Anfangshäufigkeit des Wasserstoffs zum Zeitpunkt t_0 . Für den in dieser Arbeit verwendeten Testfall ist der Wert $N_{H_2}(0) = x_0 = 100$ benutzt worden. Da der Binomialkoeffizient Terme der Größenordnung $x_0! \gg 10^{64}$ enthält, geschieht die Berechnung des Binomialkoeffizienten mithilfe seiner Darstellung als Produkt rationaler Terme. Zur Lösung der Gleichung 2.24 wurde in dieser Arbeit dafür das Softwarepaket *DVODE* verwendet (Brown et al., 1989). Der Vergleich der Wahrscheinlichkeitsdichte als Resultat der numerischen Lösung der Gleichung 2.24 mit der analytisch bekannten Lösung aus Gleichung 2.28 ist in Abbildung 2.2 für einige Wahrscheinlichkeiten graphisch dargestellt. Die gute Übereinstimmung zwischen der numerischen und der analytischen Lösung zeigt die korrekte numerische Repräsentation der Bedingungen 2.25 und 2.26.

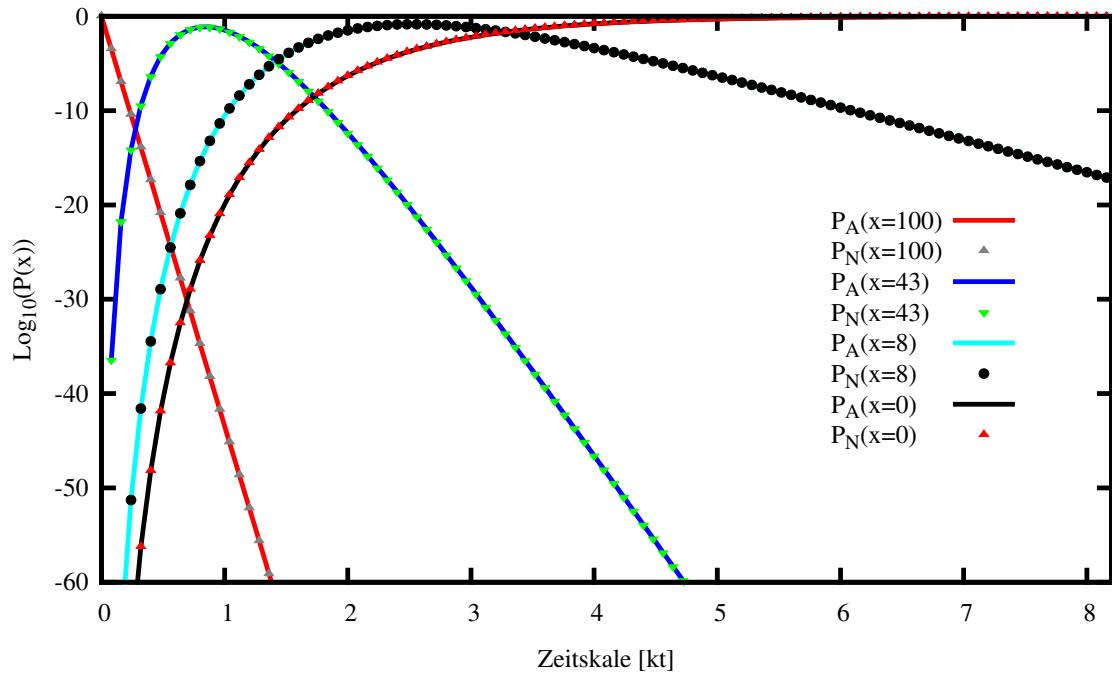


Abbildung 2.2: Vergleich zwischen der numerischen und der analytischen Lösung des Aufrierens von molekularem Wasserstoff - Die Abbildung zeigt den zeitlichen Verlauf ausgewählter Wahrscheinlichkeiten als Resultat der numerischen Lösung der CME (Gleichung 2.24) ($P_N(x)$) für die Reaktion 2.27, sowie die mithilfe der Gleichung 2.28 berechneten analytische Werte ($P_A(x)$).

2.3.2.2 Anwendung in einem kleinen Netzwerk

Staubkörner unterliegen aufgrund ihrer Entstehung an den Rändern von Sternen (Dirks et al., 2008) einer komplexen Entstehungsgeschichte, welche insbesondere zur Folge hat, dass sie eine Größenverteilung aufweisen (Draine, 2003). Bei einer Simulation der einfachen in Abbildung 2.7 gezeigten Reaktionsnetzwerke auf den Körnern zeigte sich (Barzel und Biham, 2007a), dass die Simulation der chemischen Kinetik auf den Staubkörnern insbesondere für kleine Staubkörner gegenüber dem Ratenansatz (vgl. Abschnitt 2.3.4.3) Unterschiede erbrachte, wohingegen Resultate auf großen Körnern weitaus geringere Abweichungen erzielten. Dieses, auch für noch kleinere Netzwerke (Biham et al., 2001) gültige Resultat, ist in Abbildung 2.3 anhand der durchgeführten Simulation eines Systems der Oberflächenspezies H , O , OH für ein Korn mit $r_g = 10^{-1} \mu m$ und eines mit $r_g = 10^{-2} \mu m$ gezeigt. Die Resultate zeigen, dass die Simulation mithilfe des Ratenansatzes gegenüber der exakten Simulation mithilfe der Mastergleichung wie erwartet abweichende Resultate erzielt. Demgegenüber steht der Nachteil, dass nur Reaktionsnetzwerke geringer Größe, typischerweise mit 2-3 Spezies auf dem Korn, simuliert werden können, um nicht zu stark der kombinatorischen Explosion der CME zu unterliegen. Bei den in der Literatur geschilderten umfangreichsten Berechnungen dieser Art wurden 5 (Stantcheva et al., 2002) bzw. 11 (Stantcheva und Herbst, 2003) oder auch 21 (Stantcheva und Herbst, 2004) Oberflächenspezies verwendet. Bei diesen Simulationen (Stantcheva und Herbst, 2003, 2004;

2. STAND DER FORSCHUNG

Stantcheva et al., 2002) sind die Oberflächenspezies als Teil eines eingeschränkten Reaktionsnetzwerkes mithilfe des Masteransatzes simuliert worden und über einen hybriden Ansatz (vgl. Abbildung 2.4) an das Gas gebunden. Die dabei verwendete Maximalzahl einzelner Spezies auf dem Korn führt jedoch selbst bei einer moderaten Anzahl an Oberflächenspezies zu einer beträchtlichen Zahl ($N > 800$) (Stantcheva und Herbst, 2003) zu lösender gekoppelter gewöhnlicher Differentialgleichungen.

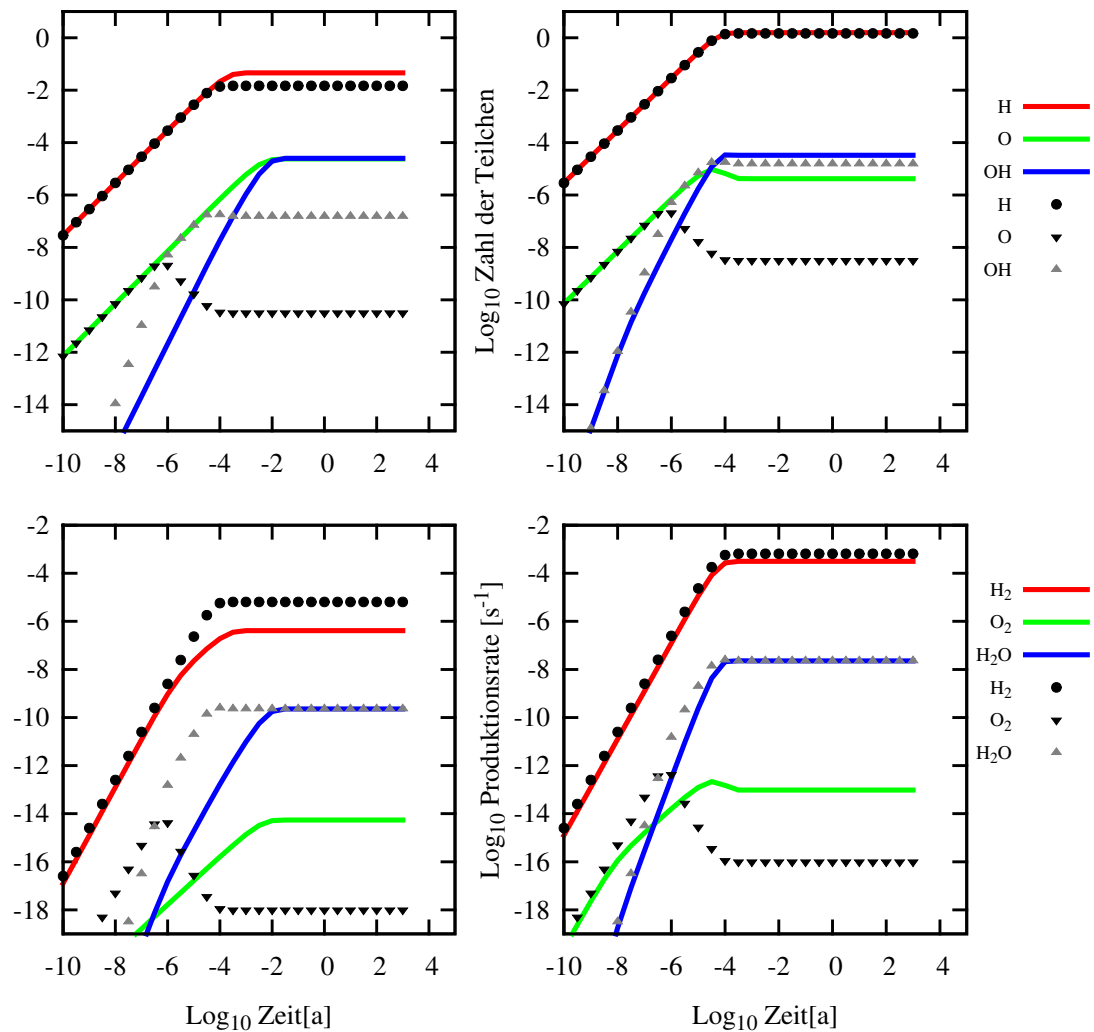


Abbildung 2.3: Populationen der Spezies auf dem Staubkorn und Produktionsraten der auf dem Staubkorn erzeugten gasförmigen Produkte - Die Abbildung zeigt die Populationen der Spezies auf einem großen ($r_g = 10^{-1} \mu m$) bzw. kleinen Staubkorn ($r_g = 10^{-2} \mu m$), sowie die Raten, mit denen die entsprechenden Produkte H_2O , O_2 und H_2 gebildet werden. Die linke Teilabbildung zeigt dabei die Resultate für das kleinere Staubkorn, während die rechte Abbildung die Resultate für das größere Staubkorn veranschaulicht. Die Resultate der Berechnung mithilfe der direkten Lösung der CME sind mit durchgezogenen Linien verzeichnet, während die Resultate des Ratenansatzes (vgl. Kapitel 2.3.4.3) mit Symbolen markiert sind. Für ein größeres Korn sowie größere Populationen der Spezies ergeben sich bessere Übereinstimmungen zwischen beiden Berechnungsmethoden.

Diese Resultate zeigen, dass die Populationen der Spezies auf den Körnern mithilfe des Ratenansatzes (formuliert in Abschnitt 2.3.4.3) sehr gut erfasst werden, und zwar sowohl für große als auch für kleine Körner. Das ist auch deshalb bemerkenswert, weil auf kleinen Körnern aufgrund der geringeren Population größere stochastische Fluktuationen auftreten. Dennoch ist die Übereinstimmung im Falle des kleinen Korns von geringerer Güte (vgl. Barzel und Biham,

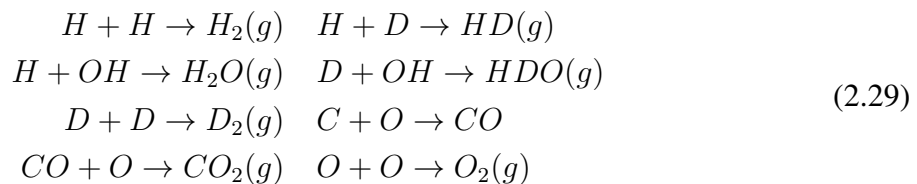
2. STAND DER FORSCHUNG

2007a). Ein vollständig anderes Bild ergibt sich, wenn man die Produktionsraten derjenigen Spezies betrachtet, die auf dem Korn gebildet werden und anschließend in die Gasphase übertreten. Hier zeigt sich, dass die Produktionsraten, welche mithilfe des Ratenansatzes berechnet wurden, oft jene der direkten Lösung der Mastergleichung 2.24 übertreffen. Dieses in Abbildung 2.3 gezeigte Resultat wird verständlich, wenn man berücksichtigt, dass Spezies mit einer Häufigkeit $\ll 1$ bei der direkten Lösung der Mastergleichung keinen Beitrag zur Produktionsrate einer Spezies leisten können, wohingegen sie im thermodynamischen Grenzfall, der dem Ansatz der Ratengleichung entspricht, einen - wenn auch kleinen - Beitrag leisten können. Dabei ist zu erkennen, dass die Übereinstimmung zwischen dem Ratenansatz und der direkten Lösung der CME im Falle des größeren Korns besser ist, wohingegen die Übereinstimmung im Falle des kleinen Korns schlechter ist (Abbildung 2.3).

Da die chemischen Prozesse auf dem Korn sehr schnell ins Gleichgewicht kommen würden (vgl. Abbildung 2.3), gibt es die Möglichkeit der Annahme eines dynamischen Gleichgewichtes auf dem Korn (d.h. $\frac{dP}{dt} = 0$) und einer nachfolgend algebraischen Lösung des entstehenden linearen Gleichungssystems (Biham und Lipshtat, 2002). Da jedoch mit zunehmender Zahl an Spezies und ihrer Wechselwirkungen die Methode von Biham und Lipshtat (2002) nicht weiter anwendbar ist und auch die Annahme eines Gleichgewichtes nicht gewährleistet werden kann, wurde auf eine Anwendung dieses Ansatzes verzichtet.

2.3.2.3 Anwendung im Hybriden Modell

Ein weiterer Ansatz ist die Modellierung der Gasphase mithilfe des Ratenansatzes und die Modellierung der Populationen auf dem Staubkorn mithilfe einer direkten Lösung der CME. Diese Methode unterscheidet sich gegenüber den Arbeiten von Stantcheva und Herbst (2003, 2004); Stantcheva et al. (2002) insbesondere in den maximal möglichen Besetzungszahlen für die auf der Oberfläche möglichen Zustände, welche mit einer maximalen Besetzungszahl von 7 für jede Spezies weitaus höher besetzt werden können. Das verwendete Reaktionsschema für die auf dem Staubkorn ablaufenden Reaktionen ist dabei notwendigerweise vereinfacht und besteht aus den folgenden 6 Spezies H, D, OH, C, O, CO , welche durch 8 Reaktionen miteinander gekoppelt waren:



Das Ziel dieses Modells ist es insbesondere, die D/H Fraktionierung des molekularen Wasserstoffs und des Wassers beschreiben zu können. Wie man leicht anhand des Reaktionsschemas (Gleichung 2.29) ablesen kann, ist zu diesem Zweck keine Erstellung einer Mastergleichung mit 6 Spezies erforderlich. Es genügt, zwei Mastergleichungen mit je drei Spezies H, D, OH bzw. C, O, CO zu bilden und diese an die chemische Berechnung der Gasphase anzubinden. Das Schema ist dabei in Abbildung 2.4 veranschaulicht. Die Mastergleichung wird dabei mit je 512

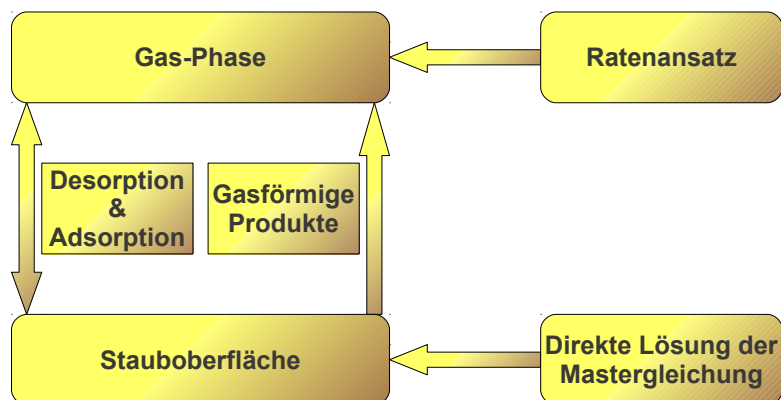


Abbildung 2.4: Schema für die Simulation der chemischen Kinetik mithilfe des Hybrid-Ansatzes - Bei der Simulation mithilfe des Hybrid-Ansatzes wird die Oberflächenphase bestehend aus 6 Spezies mithilfe der Desorption bzw. Adsorption an die Gasphase gekoppelt. Infolgedessen lässt sich die Oberfläche mithilfe des Masteransatzes, also der Lösung der CME, behandeln. Die Adsorptionsraten bzw. Desorptionsraten ebenso wie die Produktionsraten der gasförmigen Produkte (Gleichung 2.29) stellen dagegen gewöhnliche Raten dar und lassen sich direkt in die Simulation der Gasphase mithilfe des Ratenansatzes (Abschnitt 2.3.4.3) einbinden.

Zuständen, d.h. maximal 7 Teilchen je Spezies, konstruiert. Die benötigten Desorptionsenergien für OH , CO entsprechen jenen von Das et al. (2008), die Energien für die Spezies H , D sind Lipshtat et al. (2004) entnommen, während die entsprechenden Energien für die beiden Spezies C , O in der Arbeit von Aikawa et al. (1996) zu finden sind. Für die Kinetik der Gas-Phase wurde die UMIST-Datenbank von Manchester zugrunde gelegt (Le Teuff et al., 2000; Millar et al., 1997; Woodall et al., 2007) sowie die aus der Literatur (Brown und Rice, 1986a,b; Flower et al., 2004; Hiraoka et al., 2005; Howe und Millar, 1993; Howe et al., 1994; Millar et al., 1989; Osamura et al., 2005; Roueff et al., 2007; Tielens, 1983; Walmsley et al., 2004; Willacy, 2007) ermittelten Reaktionen des schweren Wasserstoffisotops Deuterium D , die der Datenbank hinzugefügt wurden. Das so entstandene System beinhaltet damit ≈ 5200 Reaktionen für die Gasphase und ≈ 8000 Reaktionen für die Staubphase sowie 499 Spezies für die Gasphase und 1036 Spezies für die entsprechenden Besetzungswahrscheinlichkeiten und Momente der Staubphase. Aufgrund der vorhandenen stochastischen Fluktuationen ist eine Simulation dieses Systems - mithilfe des *DVODE*-Softwarepaketes (Brown et al., 1989) - gegenüber einem vergleichbarem Ratenansatz um ein vielfaches rechenintensiver und benötigt Tage zur Simulation, während die Simulation desselben Systems mithilfe des reinen Ratenansatzes allenfalls Minuten benötigt. Die Abbildung 2.5 zeigt einen Vergleich der mithilfe dieser Methoden erzielten

2. STAND DER FORSCHUNG

Ergebnisse wobei ersichtlich ist, dass der Ratenansatz auch für das vorliegende stochastische Regime mit einer Staubtemperatur von $T_d = 20K$ eine hinreichende Übereinstimmung mit den Resultaten des Hybrid-Ansatzes besitzt.

2.3.3 Stochastische Simulation der Trajektorien

2.3.3.1 Der Stochastische Simulations-Algorithmus

Wie im vorherigen Kapitel ausgeführt wurde, ist die exakte Lösung für die CME nicht möglich, da die Gleichung einer klassischen kombinatorischen Explosion unterliegt, was die Zahl der zu berücksichtigenden Gleichungen betrifft (McQuarrie, 1967). Statt einer direkten Lösung der Gleichung 2.24 kann man jedoch auch eine stochastische Simulation der Reaktionspfade, welche ein gegebenes System zu durchlaufen vermag, durchführen. Die der Bewegungsgleichung zugrunde liegende Wahrscheinlichkeitsdichte $P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)$ gibt jedoch lediglich an, mit welcher Wahrscheinlichkeit der Zustand \mathbf{x} zum Zeitpunkt t eintritt. Für eine stochastische Simulation benötigt man jedoch eine andere Wahrscheinlichkeitsdichte $P(j, \tau | \mathbf{x}, t)$ (Gillespie, 1992). Diese Wahrscheinlichkeitsdichte ist so definiert, dass $P(j, \tau | \mathbf{x}, t) \cdot \Delta\tau + o(\Delta\tau)$ die Wahrscheinlichkeit angibt, mit der der gegebene Zustand \mathbf{x}, t durch die j -te Reaktion geändert wird und dies im Zeitintervall $[t + \tau, t + \tau + \Delta\tau]$ geschieht. Die Ableitung dieser Wahrscheinlichkeitsdichte soll hier nicht wiederholt werden und führt zu folgendem Resultat (Gillespie, 1976, 1992, 1977; Szallasi et al., 2010):

$$\begin{aligned} P(j, \tau | \mathbf{x}, t) &= a_j(\mathbf{x}) \cdot e^{-a_0(\mathbf{x})\tau} \\ a_0(\mathbf{x}) &= \sum_{j=1}^M a_j(\mathbf{x}) \end{aligned} \tag{2.30}$$

Dabei bezeichnet M die Zahl der Reaktionen des chemischen Systems. Zur Durchführung einer stochastischen Simulation muss man aus Gleichung 2.30 noch zwei fundamentale Wahrscheinlichkeitsdichten ableiten: Zum ersten benötigt man die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(j | \mathbf{x}, t)$, dass die j -te Reaktion eintritt, zum zweiten benötigt man die Wahrscheinlichkeitsdichte $P(\tau | \mathbf{x}, t)$ für die Zeitspanne τ , welche bis zum Eintreten der nächsten Reaktion verstreicht. Diese Wahrscheinlichkeitsdichten lassen sich leicht aus Gleichung 2.30 ableiten:

$$\begin{aligned} P(j | \mathbf{x}, t) &= \int_0^\infty P(j, \tau | \mathbf{x}, t) d\tau = \frac{a_j(\mathbf{x})}{a_0(\mathbf{x})} \\ P(\tau | \mathbf{x}, t) &= \sum_{j=1}^M P(j, \tau | \mathbf{x}, t) = a_0(\mathbf{x}) \cdot e^{-a_0(\mathbf{x})\tau} \end{aligned} \tag{2.31}$$

Die Gleichung 2.31 ermöglicht es nun, eine stochastische Simulation des stochastischen Systems auszuführen. Der zugrunde liegende Stochastische Simulations-Algorithmus (SSA) ist zuerst von Gillespie (1976) beschrieben worden. Die grundlegende Idee besteht darin, eine

zufällige Trajektorie zu durchlaufen, wobei gemäß der Verteilungen aus Gleichung 2.31 zum Zeitpunkt t mit gegebenen Häufigkeiten \mathbf{x} zufällig eine Reaktion j und eine Zeit zur nächsten Reaktion τ gewählt wird. Nach Durchführen dieser Reaktion wird die Simulation beim neuen Simulationszeitpunkt $t + \tau$ fortgesetzt, bis die gewählte gesamte Simulationszeitspanne erreicht ist. Zur Berechnung der interessierenden Mittelwerte benötigt man eine große Zahl von Realisierungen einzelner stochastische Pfade ($N \gtrsim 10^4$), um das statistische Rauschen σ_N hinreichend klein zu halten (wobei $\sigma_N \propto N^{-\frac{1}{2}}$ (Binder, 1986; Coffey et al., 1996; Ghahramani, 2005)). Diese langsame Konvergenz lässt sich nur in Spezialfällen beschleunigen (Trobec et al., 2009), so dass einzig eine Parallelisierung des SSA infrage kommt. Da beim SSA jedes einzelne Reaktionsereignis effektiv simuliert wird (Charnley, 1998, 2001; Charnley und Rodgers, 2009; Vasyunin et al., 2009), liegt es nahe, *parallel* so viele Zufallszahlen zu erzeugen wie stochastische Trajektorien benötigt werden. Dieser Schritt ermöglicht es, die zufällige Wahl der Reaktion sowie die zufällige Wahl der Zeit zur nächsten Reaktion *parallel* durchzuführen. Dies führt zum eigentlichen Geschwindigkeitszuwachs der parallelen Implementierung gegenüber der seriellen Berechnung wie z.B. in Charnley (1998, 2001); Vasyunin et al. (2009). Für den für die Simulation der Zufallszahlen notwendigen Zufallszahlengenerator - der gemäß (Ghahramani, 2005; Press et al., 2007) implementiert wurde - ist der Mersenne Twister (Matsumoto und Nishimura, 1998) mit einer extrem langen Periode $N \gg 10^{100}$ verwendet worden¹. Die Parallelisierung wurde mithilfe der OpenMP-Methodik (Chapman et al., 2007) durchgeführt. Bevor die Skalierungsergebnisse dieser Parallelisierung betrachtet werden, soll zunächst die Konsistenz des Algorithmus durch die Betrachtung eines Testfalles für die Implementierung eines SSA beschrieben werden.

2.3.3.2 Analytischer lösbarer Testfall

Wie im Abschnitt 2.3.2 ausgeführt wurde, ist eine direkte Lösung der Mastergleichung praktisch nicht möglich. Aus der chemischen Mastergleichung (CME), Gleichung 2.24, lässt sich die Bewegungsgleichung für den Mittelwert einer Spezies des Systems ermitteln. Diese Gleichung wird in Abschnitt 2.3.4 abgeleitet, so dass das Ergebnis hier zunächst vorweggenommen wird:

$$\frac{d}{dt}\langle \mathbf{x} \rangle = \sum_{j=1}^M \nu_j \langle a_j(\mathbf{x}) \rangle \quad (2.32)$$

Dieses System aus gewöhnlichen Differentialgleichungen lässt sich vereinfachen, wenn es sich ausschließlich um monomolekulare Reaktionen (vgl. Gleichungen 2.9, 2.12) handelt, da dann $\langle a_j(\mathbf{x}) \rangle = a_j(\langle \mathbf{x} \rangle)$ gilt. Es führt dann zu einer *geschlossenen* analytischen Lösung, die gleichermaßen eine Lösung für eine stochastische Simulation des gleichen Systems darstellt. Mithilfe der gut entwickelten numerischen Methoden zur Lösung gewöhnlicher Differentialgleichungen (Brown und Hindmarsh, 1989; Brown et al., 1989; Cash und Gladwell, 1992; Hairer et al., 2011; Hairer und Wanner, 2010), lässt sich so ein Test der stochastischen Simulationsmetho-

¹Dabei wurde eine in Fortran und C geschriebene Routine, die von der Webseite <http://www.math.sci.hiroshima-u.ac.jp/~m-mat/MT/emt.html> heruntergeladen werden konnte, entsprechend modifiziert.

2. STAND DER FORSCHUNG

de gut durchführen. Das in dieser Arbeit verwendete System lässt sich mithilfe der Rate12-Datenbank aus Manchester (McElroy et al., 2013) konstruieren. Dabei werden nur die Reaktionen der Gestalt 2.9 berücksichtigt. Die Konzentrationen der Spezies werden dabei aus McElroy et al. (2013) übernommen, ebenso wie der Simulationszeitraum $t_f = 0.17$ Myr. Als Reaktionsvolumen (siehe ggf. Gillespie, 2007) wird in der Simulation $2 \cdot 10^3 \text{ cm}^3$ verwendet, was aufgrund des gegenüber Vasyunin et al. (2009) geringeren Reaktionsvolumens zu Ergebnissen mit geringerer numerischer Auflösung führt, für den Testfall aber ausreichend ist. Um die Häufigkeiten der Spezies $n_Y(t)$ im Wertebereich $[0, 1]$ darstellen zu können, wurde mithilfe der in der Simulation auftretenden Maximalwerte $n_Y^{(u)}$ bzw. Minimalwerte $n_Y^{(l)}$ folgende Transformation durchgeführt:

$$\hat{n}_Y(t) = \frac{\log\left(\frac{n_Y(t)}{n_Y^{(l)}}\right)}{\log\left(\frac{n_Y^{(u)}}{n_Y^{(l)}}\right)} \quad (2.33)$$

Die derart transformierten Spezies $\hat{n}_Y(t)$ ($0 \leq \hat{n}_Y(t) \leq 1$) sind in Abbildung 2.6 dargestellt. Wie aus der Abbildung ersichtlich ist, konvergiert der stochastische Simulationsalgorithmus mit $N = 5 \cdot 10^4$ Realisierungen des Zufallsprozesses zum analytisch exakten Resultat.

2.3.3.3 Zusammenfassung

Eine Auswertung der Skalierungsergebnisse zeigt, dass nur rund 50% des Algorithmus effektiv parallelisiert werden konnten. Somit ist der Geschwindigkeitszuwachs von rund einem Faktor 2, sofern hinreichend viele Kerne verwendet werden, nicht ausreichend, um eine gut aufgelöste Simulation eines QSCC ($\gtrsim 300$ Gitterpunkte) auch mit chemischer Kinetik berechnen zu können, da Punktsimulationen bei geringer Dichte bereits Wochen in Anspruch nehmen können (Vasyunin et al., 2009). Es gibt alternative Ansätze für eine optimalere Berechnung der Summe $a_0(\mathbf{x})$ sowie eine bessere Wahl der auszuführenden Reaktionen (Cao et al., 2004; Gibson und Bruck, 2000; Li und Petzold, 2010; Lok und Brent, 2005; McCollum et al., 2006; Ramaswamy et al., 2009). Der in dieser Arbeit verfolgte Ansatz basierend auf der Logarithmic Direct Method von Li und Petzold (2006) führte jedoch leider nicht zu einer hinreichend schnellen Simulation.

Aufgrund der sehr kleinen Zeitskala der schnellsten Reaktionsmoden bringt auch die Anwendung des Tau-Leapings (Cao et al., 2006, 2007; Gillespie, 2001) keine hinreichende Optimierung. Vorhandene Softwarepakete lagen wiederum in einer nicht-parallelisierten Form vor (Li et al., 2008; Lok und Brent, 2005; Sanft et al., 2011) und hatten zudem nur aufwendig zu benutzende Software-Schnittstellen. Sie konnten aus diesem Grunde nicht für diese Arbeit verwendet werden. Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass die Berechnung der chemischen Kinetik mithilfe des SSA im Rahmen dieser Arbeit und für die Simulation eines QSCC zu anspruchsvoll ist und auf eine Verwendung des Algorithmus verzichtet werden musste.

2.3.4 Momenten- und Ratengleichungen

2.3.4.1 Mittelwerte der Spezies mithilfe der chemischen Mastergleichung

Der Mittelwert einer Funktion der Häufigkeiten der Spezies $f(\mathbf{x})$ lässt sich wie folgt berechnen (Binder, 1986; Coffey et al., 1996):

$$\langle f(\mathbf{x}) \rangle = \sum_{\forall \mathbf{x}}^{\infty} f(\mathbf{x}) \cdot P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \quad (2.34)$$

Man kann aus der CME, Gleichung 2.24, mithilfe dieses Zusammenhangs eine Bewegungsgleichung für die Häufigkeiten der chemischen Spezies ableiten:

$$\begin{aligned} \sum_{\forall \mathbf{x}}^{\infty} \mathbf{x} \cdot \frac{\partial P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)}{\partial t} &= \sum_{\forall \mathbf{x}}^{\infty} \sum_{j=1}^M ((\mathbf{x} - \boldsymbol{\nu}_j + \boldsymbol{\nu}_j) \cdot a_j(\mathbf{x} - \boldsymbol{\nu}_j) \cdot P(\mathbf{x} - \boldsymbol{\nu}_j, t | \mathbf{x}_0, t_0) \\ &\quad - \mathbf{x} \cdot a_j(\mathbf{x}) \cdot P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)) \\ &= \sum_{j=1}^M \left(\sum_{\forall \bar{\mathbf{x}}}^{\infty} \bar{\mathbf{x}} \cdot a_j(\bar{\mathbf{x}}) \cdot P(\bar{\mathbf{x}}, t | \mathbf{x}_0, t_0) - \sum_{\forall \mathbf{x}}^{\infty} \mathbf{x} \cdot a_j(\mathbf{x}) \cdot P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \right) \\ &\quad + \sum_{j=1}^M \boldsymbol{\nu}_j \sum_{\forall \bar{\mathbf{x}}}^{\infty} a_j(\bar{\mathbf{x}}) \cdot P(\bar{\mathbf{x}}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \\ &= \sum_{j=1}^M \boldsymbol{\nu}_j \sum_{\forall \mathbf{x}}^{\infty} a_j(\mathbf{x}) \cdot P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) \\ \frac{d}{dt} \langle \mathbf{x} \rangle &= \sum_{j=1}^M \boldsymbol{\nu}_j \langle a_j(\mathbf{x}) \rangle \end{aligned} \quad (2.35)$$

Enthält die rechte Seite dieser Bewegungsgleichung 2.35 lediglich monomolekulare Reaktionen des Typs 2.9, so gilt unter Berücksichtigung von 2.16 die Beziehung $\langle a_j(\mathbf{x}) \rangle = a_j(\langle \mathbf{x} \rangle)$, und Gleichung 2.35 stellt eine geschlossene Bewegungsgleichung für die Mittelwerte der Häufigkeiten der chemischen Spezies dar. Sobald jedoch wenigstens eine der Reaktionen bimolekular ist, lässt sich die Gleichung 2.35 nicht geschlossen lösen (Gillespie, 2007). Die numerische Lösung der Gleichung 2.35 ist Gegenstand des nächsten Abschnittes 2.3.4.2, während die Anwendung des thermodynamischen Limits auf die Ratengleichungen führt, die in Abschnitt 2.3.4.3 betrachtet werden.

2.3.4.2 Momentengleichungen

Man macht sich anhand der Gleichung 2.35 sowie anhand der Reaktionsterme (2.16-2.20) leicht klar, dass zur Berechnung der Häufigkeit einer chemischen Spezies - welche stets das erste Moment des entsprechenden stochastischen Prozesses sind - Momente zweiter Ordnung erforder-

2. STAND DER FORSCHUNG

lich sind. Die Berechnung der Momente zweiter Ordnung $\langle x_l x_k \rangle$ erfordert nun Momente höherer Ordnung (Gillespie, 2007), wie anhand der chemischen Mastergleichung (Gleichung 2.24) klar wird, wenn man die Gestalt der Reaktionsterme (2.16-2.20) berücksichtigt. Dann erfordert die Lösung der Gleichung für die zweiten Momente weitere Momente höherer Ordnung:

$$\begin{aligned} \sum_{\forall \mathbf{x}} x_l x_k \cdot \frac{\partial P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)}{\partial t} &= \sum_{\forall \mathbf{x}} \sum_{j=1}^M x_l x_k (a_j(\mathbf{x} - \boldsymbol{\nu}_j) \cdot P(\mathbf{x} - \boldsymbol{\nu}_j, t | \mathbf{x}_0, t_0) \\ &\quad - a_j(\mathbf{x}) \cdot P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)) \\ \frac{d}{dt} \langle x_l x_k \rangle &= \sum_{\forall \mathbf{x}} \sum_{j=1}^M x_l x_k (a_j(\mathbf{x} - \boldsymbol{\nu}_j) \cdot P(\mathbf{x} - \boldsymbol{\nu}_j, t | \mathbf{x}_0, t_0) \\ &\quad - a_j(\mathbf{x}) \cdot P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0)) \end{aligned} \quad (2.36)$$

Da dieses Prinzip für alle Ordnungen gilt, ist die Momentengleichung nicht geschlossen integrierbar (Gillespie, 2007). Für eine numerische Lösung muss deswegen die Gleichung 2.35 vereinfacht werden. Wenn geeignete physikalische Bedingungen vorliegen (Barzel und Biham, 2007b,c; Lipshtat und Biham, 2003), lassen sich aus der CME diejenigen Wahrscheinlichkeiten streichen, in welchen die Population mindestens einer Spezies über einem gewählten Schwellwert liegt:

$$P(\mathbf{x}, t | \mathbf{x}_0, t_0) = 0 \Leftrightarrow \exists x_i \in \mathbf{x}; x_i \geq c \quad (2.37)$$

Hierbei stellt c eine gewählte natürliche Zahl dar ($c \lesssim 2$). Benutzt man diese Bedingung in der CME, Gleichung 2.24, so erhält man ein algebraisches System, welches es erlaubt, geschlossene Bewegungsgleichungen für die Momente aufzustellen (Barzel und Biham, 2007a; Lipshtat und Biham, 2003). Da die Momentengleichungen aus der Mastergleichung abgeleitet werden, unterliegt diese Methodik wie die Mastergleichung dem Problem der kombinatorischen Explosion (Barzel und Biham, 2011; Gillespie, 2007). Dies führt dazu, dass üblicherweise lediglich eine geringe Anzahl an chemischen Spezies (Barzel und Biham, 2007b; Green et al., 2001; Le Petit et al., 2009; Rae et al., 2003) wie in Abbildung 2.7 gezeigt, oder relativ einfache Reaktionsmechanismen (Barzel und Biham, 2009b) für die Berechnung herangezogen werden können. Es zeigt sich, dass bereits für das kleinere Netzwerk in Abbildung 2.7 sechs Gleichungen für die Berechnung der verschiedenen Momente benötigt werden (Barzel und Biham, 2007b), womit die mit der Größe des Netzwerkes stark zunehmende Komplexität (Barzel und Biham, 2009a; Barzel et al., 2007) bei der Konstruktion der Momentengleichungen offensichtlich wird. Neuere Vorschläge beinhalten größere Netzwerke basierend auf binomialen Momenten (Barzel und Biham, 2011) bzw. auf erzeugenden Funktionen (Du und Parise, 2011). Dennoch muss bei allen Ansätzen eine entsprechende Vernachlässigung von Besetzungswahrscheinlichkeiten wie in Gleichung 2.37 erfolgen, um ein endliches System von gewöhnlichen Differentialgleichungen zu erhalten. Da die Population von bedeutenden Spezies wie bspw. H_2 in der Gasphase zu allen Zeitpunkten bedeutend größer als 1 ist, kann zudem ein solcher Momentenansatz nur zur Berechnung der Populationen von Spezies auf der Oberfläche von Körnern verwendet werden. Für die Ankopplung an die Gasphase ist somit ein Hybridmodell erforderlich, welches die berech-

neten Momente der Spezies auf der Oberfläche der Körner mit den Populationen der Gasphase koppelt. Da während der frühen chemischen Entwicklung eines QSCC das Auffrieren der Spezies auf die Körner dominiert (Herbst und van Dishoeck, 2009; Kupper et al., 2012), ist die Gleichung 2.37 nur für sehr große Indizes erfüllt. Dies bedeutet, dass die Momentengleichungen fortwährend aktualisiert bzw. gemäß der Bedingung der Gleichung 2.37 neu konstruiert werden müssten. Zudem müssten approximative Ansätze für die Bestimmung des Indizes c gefunden werden (dessen exakter Wert nur aus der vollen Lösung der CME ermittelbar wäre). Aus diesen Gründen konnte der Ansatz der Momentengleichungen nicht verwendet werden.

2.3.4.3 Ratengleichungen

Der Ratenansatz entspricht dem thermodynamischen Grenzfall eines im Prinzip beliebig großen Reaktionsvolumens V_R , in dem die chemischen Reaktionen ablaufen. Mathematisch lässt sich dieser Fall mithilfe der folgenden Gleichung beschreiben (Gillespie, 2007):

$$\forall i : x_i \rightarrow \infty, V_R \rightarrow \infty \wedge n_i = \frac{x_i}{V_R} = \text{const.} \quad (2.38)$$

In dieser Gleichung bezeichnet V_R das Reaktionsvolumen, während n_i die Konzentration der i -ten Spezies bezeichnet. Es lässt sich leicht einsehen, dass sich in diesem thermodynamischen Grenzfall die Gleichung 2.19 vereinfachen lässt, so dass das neue System der Reaktionswahrscheinlichkeiten (Gleichungen 2.39-2.41) wie folgt lautet:

$$a_m = k_m \cdot x_1 \quad (2.39)$$

$$a_{b1} = k_{b1} \cdot x_1 \cdot (x_1 - 1) \approx k_{b1} \cdot x_1 \cdot x_1 \quad (2.40)$$

$$a_{b2} = k_{b2} \cdot x_1 \cdot x_2 \quad (2.41)$$

Der thermodynamische Grenzfall impliziert weiterhin, dass statistische Schwankungen um den Mittelwert der Spezies, deren stochastische Trajektorie ermittelt wird, vernachlässigbar werden. Das bedeutet, dass die stochastische Trajektorie in eine kontinuierlich-analytische Trajektorie transformiert wird. Dies wiederum bedeutet, dass die Gleichungen für die Momente der chemischen Spezies 2.35 eine geschlossene Form erhalten (Gillespie, 2007):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \mathbf{x} \rangle &\approx \frac{d\mathbf{x}}{dt} \\ \langle a_j(\mathbf{x}) \rangle &\approx a_j(\mathbf{x}) \\ \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \sum_{j=1}^M \boldsymbol{\nu}_j a_j(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (2.42)$$

Gleichung 2.42 bildet die Basis für die Simulation der chemischen Kinetik mithilfe des Ratenansatzes. Diese Simulationemethode ist der am weitesten verbreitete Ansatz (Aikawa et al., 2005, 2003, 2001, 2008; Boland und de Jong, 1984; Herbst und Klemperer, 1973; Nejad und

2. STAND DER FORSCHUNG

Wagenblast, 1999; Prasad und Huntress, 1980; Wakelam et al., 2006) und ist auch in dieser Arbeit für die Simulation der chemischen Kinetik verwendet worden. Gleichung 2.42 stellt ein gekoppeltes System von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung dar, für deren Lösung vielfältige numerische Ansätze existieren (Hairer et al., 2011; Hairer und Wanner, 2010). Da sich die Gleichungen aufgrund der verschiedenen Zeitskalen, auf welchen die entsprechenden chemischen Prozesse ablaufen, in der Regel nicht mithilfe expliziter Verfahren lösen lassen (in welchen eine funktionale Abhängigkeit $\mathbf{x}(t + \tau) = F(\mathbf{x}(t_1), \mathbf{x}(t_2), \mathbf{x}(t_3), \dots), t_i \leq t)$ existiert), ist ein immens erhöhter numerischer Aufwand erforderlich, um zu einer Lösung zu gelangen (Hairer und Wanner, 2010). Dieser Tatsache wird in dieser Arbeit durch die Verwendung spezieller Lösungsalgorithmen, welche als Softwarepakete vorlagen, Rechnung getragen (Brown und Hindmarsh, 1989; Brown et al., 1989; Cash und Gladwell, 1992; Hindmarsh, 1983). Die genaue Darstellung der Algorithmen sowie die Berechnung von speziell gewählten Testfällen der weit verbreiteten (Arnold et al., 2007; González-Pinto et al., 2010) Pitagora Test Suite ¹ geschieht in dieser Arbeit in Abschnitt 4.

2.3.5 Aktuelle Modellansätze für die Entwicklung der Häufigkeiten chemischer Spezies

Im letzten Abschnitt wurde verdeutlicht, dass die Modellierung der Entwicklung der Häufigkeiten chemischer Spezies bei gegenwärtig zur Verfügung stehender Rechenleistung in der überwiegenden Mehrzahl der Fälle mithilfe des Ratenansatzes geschehen wird. Aufgrund des außerordentlich hohen Aufwandes, den diskret-stochastische Verfahren erfordern, waren die zuvor aus der Literatur entnommenen und in den jeweiligen Abschnitten diskutierten Verfahren allesamt nulldimensional, d.h. sie haben keine Berücksichtigung der in einem QSCC vorliegenden örtlich abhängigen physikalischen Parameter vorgenommen. Es existiert in der Literatur eine Vielzahl an Arbeiten, die sich mit der Modellierung der in dieser Arbeit untersuchten QSCC in chemischer Hinsicht beschäftigen und mit dem Ratenansatz arbeiten (Aikawa et al., 2005; Boland und de Jong, 1984; Herbst und Klemperer, 1973; Nejad und Wagenblast, 1999; Prasad und Huntress, 1980; Wakelam et al., 2006).

Viele dieser Arbeiten benutzen dabei völlig analog einen nulldimensionalen Zugang in Bezug auf die physikalisch relevanten Parameter (wie bspw. Albertsson et al., 2013; Smith et al., 2004; Wakelam et al., 2006; Woodall et al., 2007). Die Betrachtung lokal variabler physikalischer Bedingungen, wie sie in Riesen-Molekülwolken vorzufinden sind, wurde mithilfe verschiedener Approximationen der Struktur als simple geometrische Objekte frühzeitig vorgenommen (Boland und de Jong, 1984; Prasad und Huntress, 1980). So basieren die Berechnungen von Boland und de Jong (1984) auf einer sphärisch-symmetrischen Gaskonfiguration mit einem thermischen Modell, welches mit einem parametrischen Ansatz an die Gasphase gekoppelt wurde. Weitere Modelle mit vorliegender radialer Symmetrie berücksichtigen die Staubchemie, vernachlässigen aber das Temperaturprofil im QSCC, indem sie konstante Gastemperaturen an-

¹Zu finden unter <http://www.dm.uniba.it/~testset/testsetivpsolvers/>

nehmen (Aikawa et al., 2005, 2003, 2001; Visser et al., 2011, 2009), wobei der sich anschließende Kollaps mit radial variablen Temperaturen berechnet wird (Aikawa et al., 2008; Visser et al., 2011, 2009). Wie Beobachtungen zeigen, sind die Temperaturprofile sowohl des Gases als auch des Staubs in einem QSCC allerdings variabel (Crapsi et al., 2007; Evans et al., 2001; Stutz et al., 2010) und zudem vom äußeren Strahlungsfeld abhängig (Galli et al., 2002). Mit der Inbetriebnahme des ALMA-Observatoriums sind Daten mit einer hohen Auflösung in der Größenordnung von Millibogensekunden zu erwarten (Peck und Beasley, 2008), so dass für einige der beobachteten astrophysikalischen Strukturen wie z.B. L138(L134N) (mit bisherigen Daten mit einer Auflösung im Bereich weniger Bogensekunden (Pagani et al., 2004)) die Beobachtung von Profilen radialer Konzentrationen möglich werden wird. Eine Berücksichtigung der radialen Temperaturprofile findet sich in Kupper et al. (2012), jedoch mit kleinerem Reaktionsnetzwerk und unter Vernachlässigung der für diese Arbeit bedeutsamen Isotopenchemie.

Das in dieser Arbeit beschriebene Modell erweitert vorliegende Modelle dahingehend, dass ein selbst-konsistentes radiales Profil errechnet werden kann, welches für die Berücksichtigung der Entwicklung der Häufigkeiten chemischer Spezies benutzt werden kann. Das bedeutet insbesondere, dass die Auswirkungen des radial variablen Strahlungsfeldes auf die Häufigkeiten chemischer Spezies ebenso untersucht werden können wie die Bewegung des Staubs. Das Modell von Kupper et al. (2012) wird dabei um zwei Isotope von Wasserstoff (^2H) und Stickstoff (^{15}N) erweitert, wobei mithilfe des Ansatzes von Albertsson et al. (2013) ein wesentlich umfangreicheres Reaktionsnetzwerk erstellt werden muss.

2.3.6 Schlussfolgerungen

Wie in den vorhergehenden Abschnitten erläutert wurde, basiert die chemische Kinetik aufgrund mikrophysikalischer Argumente (Gillespie, 1992; Liboff, 2003) auf der chemischen Mastergleichung (Gillespie, 2007) CME. Die Frage der Simulation der chemischen Kinetik ist damit eine Frage der Lösung der CME, Gleichung 2.24. Bis auf wenige Spezialfälle (Biham und Lipshtat, 2002; McQuarrie, 1967) lässt sich die Mastergleichung als fundamentale Bewegungsgleichung für die Besetzungswahrscheinlichkeiten nicht analytisch lösen, und man ist auf numerische Lösungsverfahren angewiesen. Diese Lösungsverfahren lassen sich folgendermaßen klassifizieren: a) direkte Lösung des Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen unter der Annahme, dass oberhalb einer gewissen geeignet gewählten Schranke alle Besetzungswahrscheinlichkeiten verschwinden (Barzel und Biham, 2007a; Stantcheva und Herbst, 2003, 2004; Stantcheva et al., 2002) (Gleichung 2.37). b) Die eigentliche stochastische Trajektorie wird durch eine stochastische Simulation ermittelt (Charnley und Rodgers, 2009; Gillespie, 1992, 2007; Vasyunin et al., 2009). c) Die Gleichung wird entweder mikrophysikalisch approximiert, ähnlich der Approximation, auf der numerische Lösungen der Mastergleichung basieren (Barzel und Biham, 2007a), was äquivalent zur Vernachlässigung höherer Terme in der Bewegungsgleichung für die Momente (Gleichung 2.35) ist, oder man geht über in den thermodynamischen Grenzfall (Gillespie, 2007), Gleichung 2.38, in welchem eine geschlossene Lösung der Momentengleichung, Gleichung 2.35, möglich ist.

2. STAND DER FORSCHUNG

Da in Gleichung 2.24 sämtliche Kombinationen bezüglich der möglichen Anzahl von Spezies des teilnehmenden Systems Berücksichtigung finden müssen, ist die Zahl der zu berücksichtigenden Gleichungen für die approximative Simulation unzureichend groß. Hybride Ansätze (Stantcheva und Herbst (2003, 2004)) wie auch der bei der IUPAC-Konferenz präsentierte (Abschnitt 2.3.2) sind letztlich nicht anwendbar, da die Bedingungen für die Approximation (Barzel und Biham, 2007a), Gleichung 2.37, insbesondere in der frühen Phase der Entstehung des Sonnensystems (Herbst und van Dishoeck, 2009; Kupper et al., 2012) nicht erfüllt werden. Dies gilt ebenso für die Lösung mithilfe der Methode der Momentengleichung (Du und Parise, 2011). Im Gegensatz hierzu gibt es beim Ansatz b) kein Limit bezüglich der Anwendbarkeit der Methode. Da jedes Reaktionsereignis effektiv simuliert werden muss, ist eine direkte Simulation jedoch zu rechenintensiv (Charnley, 1998, 2001; Gillespie, 2007; Vasyunin et al., 2009), um sie im Modell einsetzen zu können. Der Versuch einer Parallelisierung des stochastischen Simulationsalgorithmus brachte jedoch keine hinreichende Verbesserung, da die Rechenzeit gegenüber der seriellen Simulation maximal nur um etwa den Faktor $\frac{1}{2}$ verringert werden konnte. Dies ist für eine praktische Anwendung nicht ausreichend (Vasyunin et al., 2009).

Es zeigt sich, dass für die in dieser Arbeit und den zur Verfügung stehenden Zeitrahmen und insbesondere auch aufgrund der Komplexität des Modells (vgl. Abschnitt 3) nur die Anwendung des Ratenansatzes als thermodynamischer Grenzfall (Gleichung 2.38) möglich war. Die genaue Anwendung dieses Modells im Kontext dieser Arbeit, d.h. die Lösung und Anwendung der Gleichung 2.42 wird Gegenstand des Kapitels 4 sein.

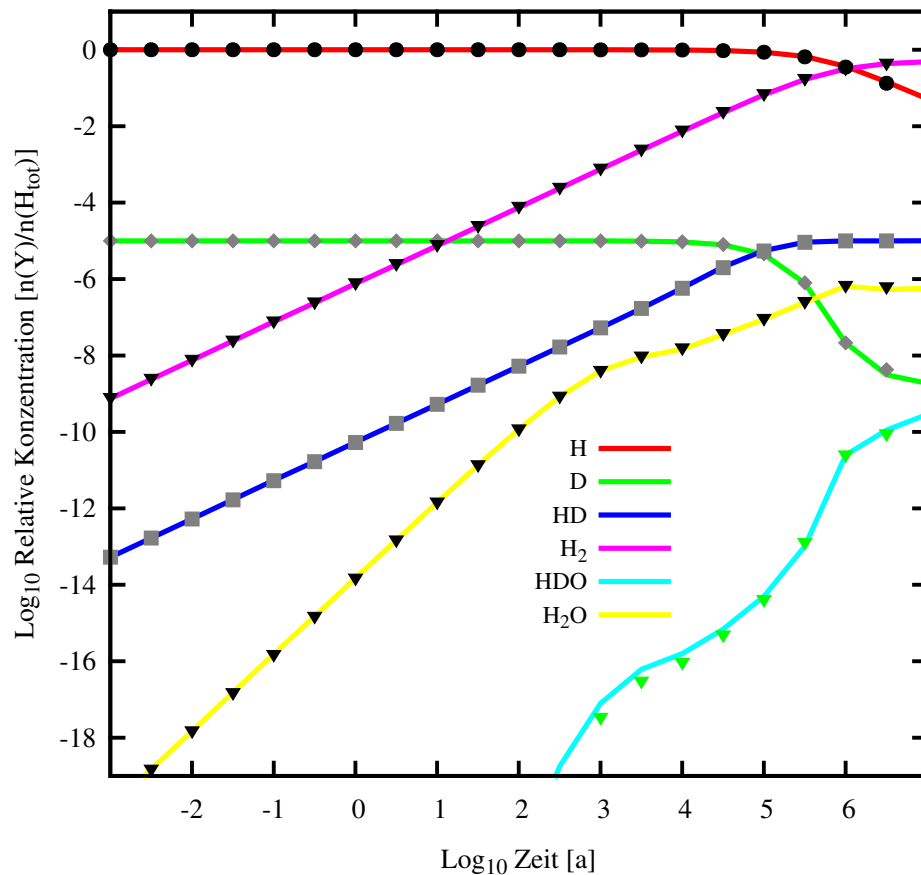


Abbildung 2.5: Resultat der Simulation des Hybriden Modells - Die Abbildung zeigt das für die D/H-Fraktionierung untersuchte System, welches auf der Kopplung einer Gas-Phase (berechnet mit einem Ratenansatz) und einer Staub-Phase (berechnet mithilfe der Lösung der Mastergleichung) mit einem eingeschränkten Reaktionsnetzwerk (vgl. Gleichung 2.29) beruht. Die berechneten Werte dieses Ansatzes sind als durchgezogene Linien im Diagramm zu sehen. Die Werte eines Modells, welches die Oberfläche ebenfalls mit dem Ratenansatz behandelt, sind mit Symbolen markiert und zeigen geringe Abweichungen. Die wesentlichen Parameter der Simulation waren: $T_d = 20K$, $T_g = 90K$, $A_V = 10mag$ und sind so gewählt, um die Oberflächenpopulationen hinreichend klein - und somit stochastisch - werden zu lassen.

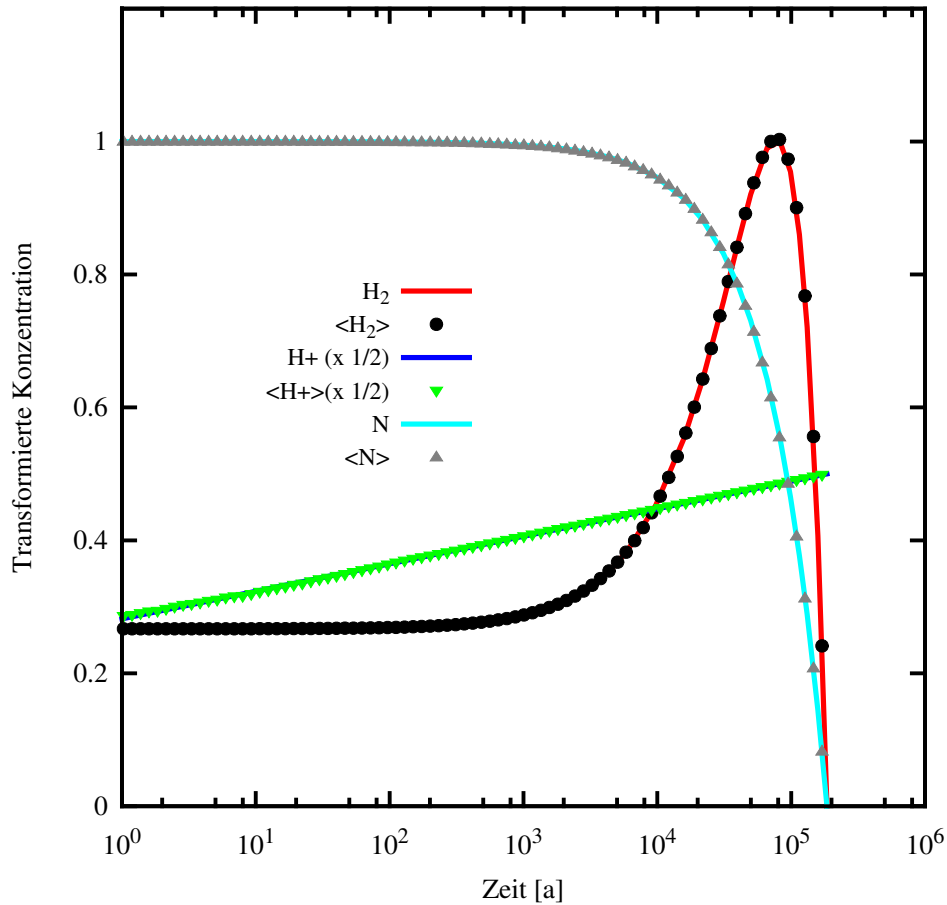


Abbildung 2.6: Ergebnisse der Berechnung des linearen Testsystems mithilfe des implementierten und parallelisierten stochastischen Simulationsalgorithmus - Die Abbildung zeigt die Berechnung des linearen Teilsystems der astrochemischen Datenbank Rate12 (McElroy et al., 2013), mithilfe des SSA. Die Ergebnisse des stochastischen Lösungsalgorithmus - genauer die Mittelwerte ($\langle \dots \rangle$) - sind mit Symbolen markiert, die Lösungen der gewöhnlichen Differentialgleichungen mit durchgezogenen Linien. Die durchschnittliche Schrittweite des SSA beträgt dabei nur $\approx 40 - 120 \text{ yr}$ so dass die Berechnung des Systems mithilfe der üblichen Lösungsverfahren (Hairer et al., 2011; Hairer und Wanner, 2010) sehr viel schneller konvergiert als der SSA.

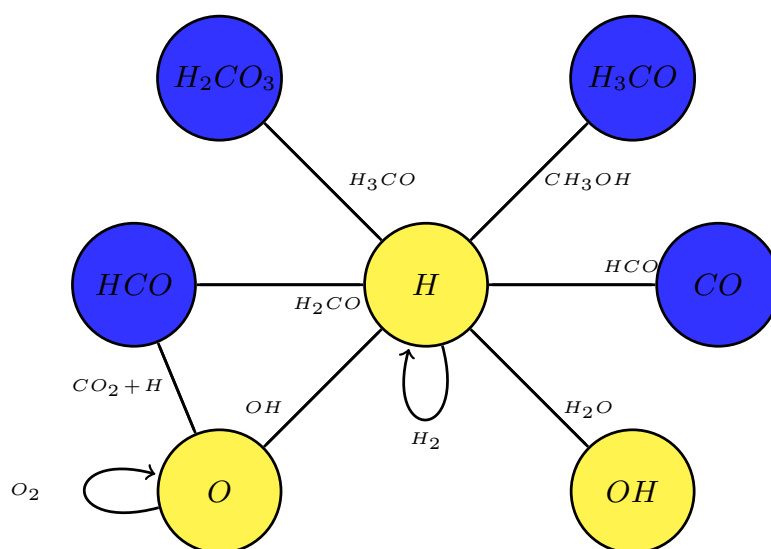


Abbildung 2.7: Mit Momentengleichung berechnete einfache Netzwerke - Die modifizierte Abbildung nach Barzel und Biham (2007b) zeigt schematisch zwei Netzwerke für die Produktion von Wasser (H_2O) bzw. Methanol (CH_3OH). Die Spezies, die als Produkt aus der Reaktion je zweier verbundener Spezies entstehen, sind an der entsprechenden Verbindung aufgetragen. Das für die Wasserproduktion benötigte Netzwerk ist gelb gekennzeichnet und wurde auch in Abschnitt 2.3.2 verwendet. Das umfangreichere Methanol-Netzwerk enthält zusätzlich zu den gelb markierten Spezies auch die blau gekennzeichneten.

2. STAND DER FORSCHUNG

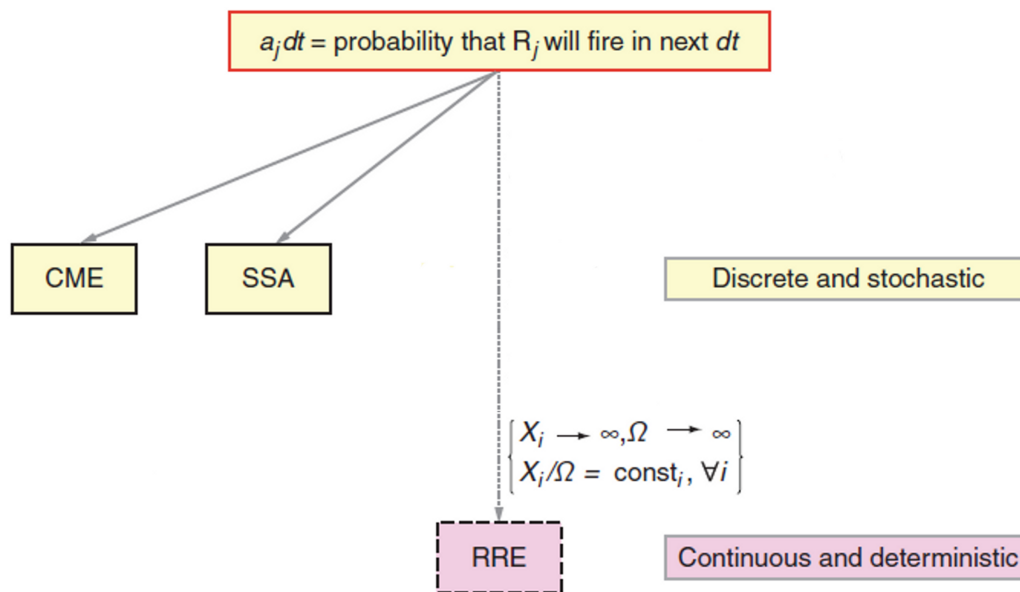


Abbildung 2.8: Schematische Darstellung der verschiedenen Lösungsmethoden der chemischen Kinetik - Die modifizierte Abbildung nach Gillespie (2007) zeigt die verschiedenen Lösungsverfahren. Direkte Lösungen erhält man aus der Lösung der Mastergleichung CME sowie aus der Stochastischen Simulation SSA. Im thermodynamischen Limit ergeben sich die Ratengleichungen RRE (in dieser Arbeit als ODE abgekürzt), welche dem Modell in dieser Arbeit zugrunde gelegt wurden.

Teil II

Formulierung des Modells

3

Staub, Gas und Strahlung

3.1 Staub und Gas

Die für uns relevanten Gas- und Molekülwolken bestehen aus Gas und - mit einem Massenanteil von $\approx 1\%$ - aus Staub (Mathis et al., 1977; Pollack et al., 1985; Zubko et al., 2004). Der Staub hat dabei auf die physikalische Struktur der Wolke einen größeren Einfluss, als es sein Massenanteil vermuten lassen würde. Er tritt mit dem interstellaren Strahlungsfeld ISRF in Wechselwirkung und bestimmt das in der Wolke vorliegende Temperaturprofil (Galli et al., 2002; Zucconi et al., 2001). Insbesondere bedeutet dies, dass auch die Temperatur des Gases - und mit ihr die Struktur des Gasprofils - beeinflusst wird (Galli et al., 2002; Goldsmith, 2001). Prinzipiell gab es während der Entstehung des solaren Nebels verschiedene Phasen mit jeweils unterschiedlichen physikalischen Bedingungen. Dies sind: a) die quasi-stationäre Phase, b) der Kollaps sowie c) die Scheiben-Phase (vgl. Kapitel 1). Das in dieser Arbeit beschriebene Modell beschäftigt sich mit dem Quasi-stationären Kern (QSCC). Natürlich liegt der Zweck dieses Modells letztlich darin, die in diesem QSCC ablaufenden chemischen Prozesse (Herbst und van Dishoeck, 2009) möglichst gut beschreiben zu können. Es war deshalb naheliegend, die minimal nötige Auflösung des Kerns im Auge zu behalten, um möglichst viele Ressourcen für die Berechnung der Häufigkeiten chemischer Spezies aufwenden zu können. Viele der in dieser Arbeit verwendeten Testfälle sind darauf ausgerichtet, was in den jeweiligen Kapiteln aber auch diskutiert werden wird.

Die Beschreibung des Modells für einen physikalischen Zustand eines QSCC wird in diesem Kapitel wie folgt dargelegt. Zunächst wird, ausgehend von den Betrachtungen in diesem einleitenden Abschnitt, in Abschnitt 3.2 auf einige wesentliche und übliche Näherungen (siehe bspw. Aikawa et al., 2005; Zucconi et al., 2001) eingegangen werden, die für ein Gasprofil, welches aufgrund eines vorliegenden Temperaturprofils ermittelt wird (Galli et al., 2002; Sipilä et al., 2011, 2010), gemacht werden können. Diese Näherungen werden in dieser Arbeit nur bei der Berechnung von einigen Testfällen von Bedeutung sein und werden aus diesem Grunde auch beschrieben. Danach wird - unter Einbeziehung aller Vereinfachungen, die durch Symmetriebetrachtungen möglich sind - die grundlegende Diskretisierung, die diesem Modell zugrunde

liegt, vorgestellt (Abschnitt 3.3). Anschließend werden der Strahlungstransport und die verwendeten Staubgrößenverteilungen untersucht, bevor das Temperaturmodell und die Erstellung eines radialen Profils $\rho_g(r)$ beschrieben werden. Nach der Darlegung dieser wesentlichen physikalischen Prozesse, welche die finale Gestalt des QSCC beeinflussen, wird es um die konkrete Berechnung des finalen Dichteprofiles gehen, welches im Rahmen einer festgelegten numerischen Auflösung das Temperaturprofil hervorrufen *muss*, mit welchem es letztlich berechnet worden war. Dieses selbst-konsistente Profil wird Gegenstand des Abschnittes 3.8 sein. Anschließend wird dieses Modell um einen mit Literaturwerten (Galli et al., 2002; Zucconi et al., 2001) weitgehend konsistenten Randdruck erweitert. Schließlich wird es um die Staubbewegung und den in dieser Arbeit benutzten Algorithmus gehen (Abschnitt 3.10).

3.2 Näherungen für das Gasprofil

In den folgenden Abschnitten wird - unter Berücksichtigung der bereits angedeuteten Approximationen - die definierende Gleichung für das hydrostatische Profil in einem QSCC abgeleitet. Diese Gleichung wird nur numerisch lösbar sein, währenddessen es für ein *isothermes* Profil einige Näherungsverfahren gibt. Der wichtigste Grund, weswegen in diesem Abschnitt kurz auf typische Näherungen eingegangen wird, liegt darin, dass diese Profile in den publizierten Modellen Verwendung fanden und zu Vergleichszwecken in der vorliegenden Arbeit ebenso verwendet wurden. Es ist deshalb sinnvoll, sich kurz mit diesen Profilen vertraut zu machen. Beobachtungen zeigen, dass viele Kerne in ihrem Zentrum nur schwach abfallende, fast konstante Dichteprofile besitzen (wie z.B. Bacmann et al., 2000), währenddessen der charakteristische Verlauf des Gasprofils in den äußeren Kernregionen einen $\rho_g(r) \propto r^{-2}$ Verlauf besitzt. Dieses Verhalten wird natürlich von der Lösung der Hydrostatischen Gleichungen im sphärisch symmetrischen Grenzfall (deren Ableitung Gegenstand des Abschnittes 3.7 sein wird) korrekt wiedergegeben, muss aber auch von allen analytischen Näherungen reproduziert werden. Im folgenden werden die drei wesentlichen Näherungen im einzelnen betrachtet.

3.2.1 Lösungen der Hydrostatischen Gleichungen

Die isotherme Bonnor-Ebert-Sphäre (BES) ist die Lösung der hydrostatischen Gleichungen im sphärisch symmetrischen Grenzfall. Es ergibt sich dabei die folgende Gleichung für das gesuchte Gasprofil, die hier ohne Ableitung angegeben wird (Bonnor, 1956):

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \left(\frac{1}{\rho_g(r)} \cdot \frac{d\rho_g(r)}{dr} \right) \right) = - \frac{4\pi\mu G \rho_g(r)}{k_b \cdot T_g} \quad (3.1)$$

In dieser Gleichung bezeichnet μ die mittlere Masse eines sich in der Wolke befindlichen Teilchens, G die Gravitationskonstante, k_b die Boltzmannsche Konstante und T_g eine für die Wolke charakteristische Gastemperatur. Die Lösung dieser Gleichung ist aufgrund der konstanten Gastemperatur mithilfe analytischer Approximationen (Hunter, 2001; Natarajan und Lynden-Bell, 1997) und der direkten Integration der Gleichung mit den zwei Bedingungen $\rho_g(r = 0) = \rho_c$

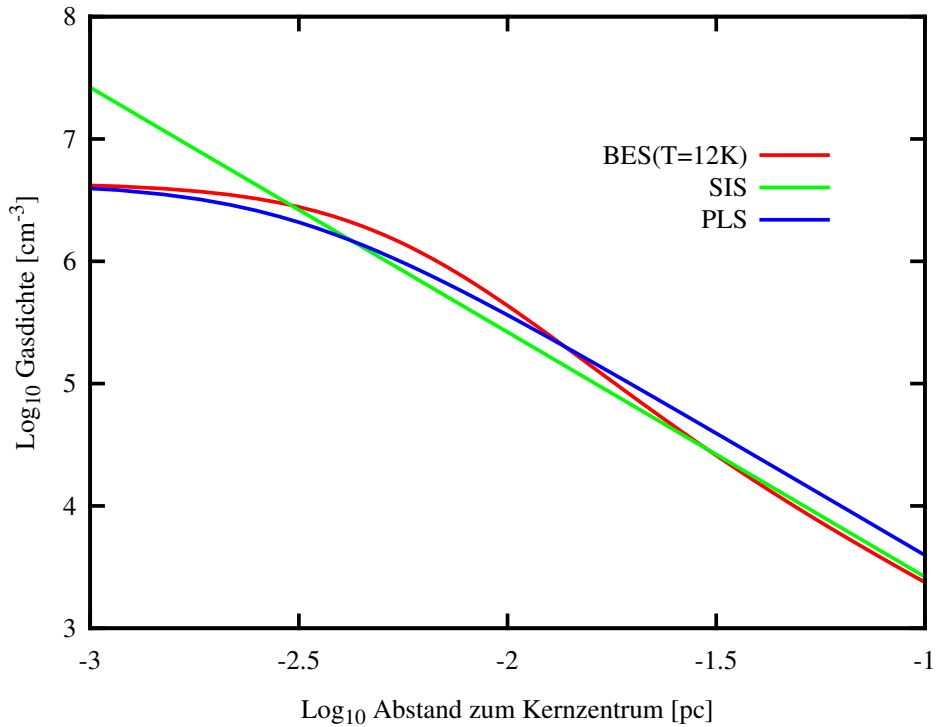


Abbildung 3.1: Radialer Verlauf der vorgestellten Näherungsprofile - Die Abbildung zeigt die verschiedenen im Text eingeführten Profile: die isotherme Bonnor-Ebert Sphäre (BES), die singuläre isotherme Sphäre (SIS) sowie das Profil nach Plummer (PLS), wobei eine repräsentative Temperatur von $T_g = 12K$ für die Lösung der Gleichung 3.2.1 gewählt wurde. Allen Profile ist der $\rho_g(r) \propto r^{-2}$ Verlauf in den äußeren Kernregionen gemeinsam, wobei dies für die singulär isotherme Sphäre in allen radialen Punkten zutrifft. Eine Besonderheit der singulären Sphäre ist weiterhin, dass sie im Kernzentrum nicht regulär ist, d.h. $\lim_{r \rightarrow 0} \rho_g^{(SIS)}(r) = \infty$

und $\frac{d\rho_g}{dr}(r=0) = 0$ möglich. Letztere Bedingung ist notwendig, um ein reguläres Profil zu erhalten. Die so erhaltene Lösung - die isotherme Sphäre - erfüllt beide durch die Beobachtungen gestellten Randbedingungen.

Eine alternative Lösung der Gleichung 3.1 ist die singuläre isotherme Sphäre (SIS), die man mittels Einsetzen des Ansatzes $\rho_g(r) = \frac{\alpha}{r^2}$ in Gleichung 3.1 erhält, worin α eine reelle Konstante ist:

$$\begin{aligned} -\frac{4\pi\mu G\alpha}{k_b \cdot T \cdot r^2} &= \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \left(\frac{r^2}{\alpha} \cdot \frac{d}{dr} \left(\frac{\alpha}{r^2} \right) \right) \right) \\ &= -\frac{2}{r^2} \end{aligned} \quad (3.2)$$

In der Tat ist diese Gleichung erfüllt, falls $\alpha = \frac{2k_b \cdot T}{4\pi\mu G}$ gesetzt wird. Diese Lösung ist jedoch nicht regulär, da natürlich $\lim_{r \rightarrow 0} \rho_g(r) = \infty$ gilt. Sie erfüllt damit von den durch die Beobachtungen

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

gestellten Forderungen nur die zweite, diese allerdings exakt, da $\rho_g(r) \propto \frac{1}{r^2}$ für alle Radien zutreffend ist. Von diesem Profil wird in Abschnitt 3.6 Gebrauch gemacht, wo es um einen Testfall für das von Zucconi et al. (2001) entworfene Modell gehen wird.

3.2.2 Das Plummer-Profil

Das Plummer-Profil (PLS) ist eine empirische, auf Beobachtungen fußende Approximation (Plummer, 1911; Whitworth und Bate, 2002) für das Gasprofil $\rho_g(r)$ von stationären oder quasi-stationären Strukturen (Arreaga-García et al., 2007). Es hat folgende allgemeine Gestalt (Arreaga-García et al., 2007; Plummer, 1911):

$$\rho_g(r) = \rho_c \cdot \left(\frac{R_0}{\sqrt{r^2 + R_0^2}} \right)^\eta \quad (3.3)$$

Dabei ist ρ_c die Dichte des Gases im Zentrum des Kerns während R_0 ein empirischer Parameter ist, der die Größe des zentralen Plateaus bestimmt, in welchem die Dichte nur schwach abfällt. η bezeichnet die Stärke des radialen Abfalls fern des im Kernzentrum vorhanden Plateaus. Wenn im Folgenden von einer Plummer-Konfiguration die Rede sein wird, so ist damit die spezielle Wahl $\eta = 2$ gemeint, welche auf folgende Konfiguration führt:

$$\rho_g(r) = \rho_c \cdot \frac{R_0^2}{r^2 + R_0^2} \quad (3.4)$$

Wie leicht zu sehen ist, erfüllt die so gegebene Dichte nach Gleichung 3.4 beide durch Beobachtungen abgeleitete Forderungen eines Plateaus im Zentrum des Kerns, d.h. $\rho_g(r) \approx \rho_c \Leftrightarrow r \approx 0$ und $\rho_g(r) \approx \frac{\rho_c \cdot R_0^2}{r^2} \Leftrightarrow r \gg R_0$. In Abbildung 3.1 sind die drei so definierten Näherungsprofile dargestellt. Natürlich wird das gesuchte Profil nur auf numerischem Wege zu erhalten sein, weshalb in den nächsten Abschnitten die verwendete numerische Methodik betrachtet wird.

3.3 Das sphärische Gitter

In diesem Abschnitt wird zur besseren Verständlichkeit der folgenden Abschnitte die verwendete Diskretisierung des quasi-stationären Kerns (QSCC) beschrieben. Zunächst gilt es dabei zu überlegen, ob sich Freiheitsgrade aufgrund vorhandener Symmetrien einsparen lassen. Eine wichtige Erkenntnis ist dabei, dass viele der QSCC entweder als sphärisch-symmetrisch angenähert werden können (Bacmann et al., 2000; Peng et al., 1998), bzw. selbst bei nicht vorliegender sphärischer Symmetrie sich gut durch sphärisch-symmetrische Strukturen annähern lassen (Bergin und Tafalla, 2007; Burkert und Alves, 2009). Neben der sphärisch-symmetrischen Gaskonfiguration kann man auch das Strahlungsfeld als isotrop annehmen (Evans et al., 2001; Zucconi et al., 2001). Lokal vorliegende Strahlungsquellen würden zu einem Bruch der sphärischen Symmetrie führen. Da man aber keine hinreichend genaue Kenntnis über die Umgebung des frühen solaren Nebels hat (Montmerle et al., 2006), wäre eine Verwendung einer lokalen

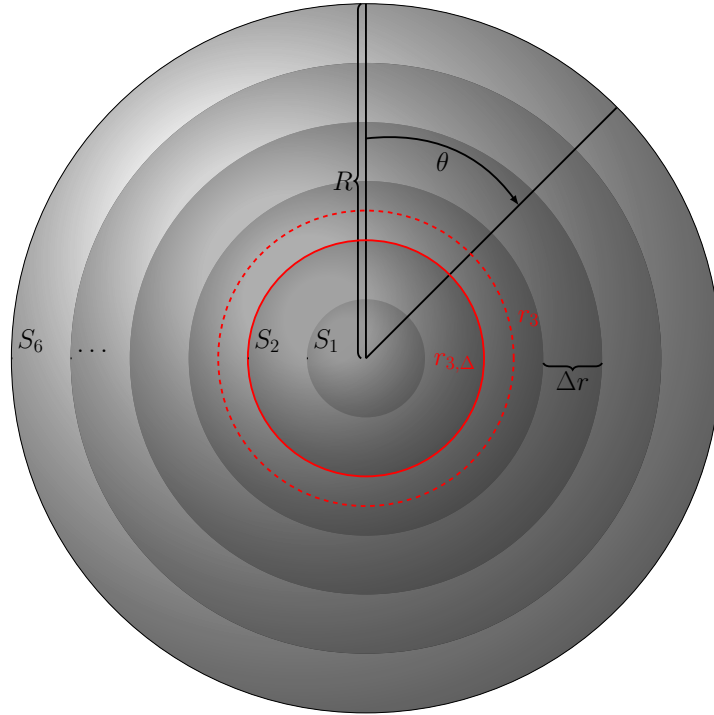


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung der Diskretisierung des QSCC - Die Abbildung zeigt schematisch die wesentlichen anhand der Gleichungen 3.5 eingeführten Parameter. Der Übersichtlichkeit halber ist nur ein Kern mit 6 Schalen gezeigt. Gut aufgelöste Kerne besitzen $N \gtrsim 300$ Schalen.

Quelle spekulativer als die so vorliegende Approximation. Ein eindimensionales Gitter ist jedoch nicht hinreichend, da der Strahlungstransport, der in Abschnitt 3.4 beschrieben wird, ein rein sphärisch-symmetrisches Modell nicht erlauben würde. Es zeigt sich jedoch und wird in den nächsten Abschnitten auch verständlich werden, dass für die vollständige Charakterisierung des Wolkenkerns zwei Freiheitsgrade genügen, da die Rotationssymmetrie auch bei vorliegendem Strahlungstransport erhalten bleibt. Das Modell in dieser Arbeit basiert auf der Verwendung von Kugelkoordinaten r, θ, ϕ , wobei aufgrund der vorliegenden Rotationssymmetrie ein zweidimensionales Gitter r, θ vorliegt. Wie sich im Abschnitt 3.4 zeigen wird, wäre ein diskretes starres Gitter für den polaren Winkel θ aufgrund der erforderlichen variablen Auflösung bei der Lösung der Strahlungstransportgleichung (Gleichung 3.7) nicht hilfreich. Es zeigt sich vielmehr, dass es günstig ist, diese Variable als kontinuierlich aufzufassen. Die notwendige Diskretisierung wird dabei adaptiv während der Integration der Gleichung 3.7 vorgenommen und muss deshalb hier nicht weiter erläutert werden. Für den durch Strahlungsdruck bewirkten Transport von Staubkörnern wiederum wird in dieser Arbeit ein expliziter Ansatz mit nicht-adaptivem d.h. starrem Gitter verwendet. Die entstehenden sphärische Schalen $S_k, k = 1, \dots$ werden dabei wie folgt

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

definiert:

$$\begin{aligned}\Delta r &= \frac{R}{N} \\ r_k &= \Delta r \cdot \left(k - \frac{1}{2}\right), k = 1, \dots, N \\ r_{k,\Delta} &= r_k - \frac{\Delta r}{2} \\ S_k &= \left\{r \mid r_k - \frac{\Delta r}{2} \leq r \leq r_k + \frac{\Delta r}{2}\right\}, k = 1, \dots, N \\ V_k &= 4\pi \cdot \int_{S_k} \hat{r}^2 d\hat{r}\end{aligned}\tag{3.5}$$

Dabei ist R der Radius des QSCC, r die Entfernung vom Zentrum des QSCC und V_k das Volumen der entstandenen k -ten sphärischen Schale. Die so definierten Variablen sind in Abbildung 3.2 exemplarisch anhand eines mit lediglich 6 Schalen diskretisierten QSCC veranschaulicht.

3.4 Strahlungstransport

Zur Berechnung der Bewegung der Staubkörner sowie zur Berechnung der Gas- und Staubtemperaturen ist eine Kenntnis des Strahlungsfeldes an einem gegebenen Ort im Kern notwendig. Des weiteren benötigt man auch zur Berechnung der Raten strahlungsgetriebener Reaktionen eine Kenntnis des Strahlungsfeldes. Da das Strahlungsfeld durch Emission, Absorption und Streuung verändert werden kann, spricht man vom Transport der Strahlung durch ein Medium. Greift man einen beliebigen Pfad in diesem Medium heraus, so lässt sich die folgende Strahlungstransportgleichung ableiten (Chandrasekhar, 1960; Dyson und Williams, 1980):

$$\frac{dI_\nu}{ds} = -(\kappa_\nu + \sigma_\nu) \cdot \rho I_\nu + j_\nu\tag{3.6}$$

Dabei beschreibt I_ν die Intensität der Strahlung der Frequenz ν , $\frac{dI_\nu}{ds}$ die Änderung der Intensität in Abhängigkeit von der Bogenlänge s des Pfades, κ_ν die bei dieser Frequenz im Medium mit der Dichte ρ einhergehenden Verluste durch Absorption der Strahlung im Medium, σ_ν die durch Streuung entstehenden Verluste im Medium sowie ferner j_ν mögliche Strahlungsquellen die zur Änderung der Intensität beitragen. Diese allgemeine Form der Transportgleichung lässt sich für die untersuchten QSCC vereinfachen, da diese optisch dünn gegenüber ihrer eigenen emittierten Strahlung sind ($j_\nu \approx 0$), sowie nur schwache Streueffekte aufweisen (Zucconi et al., 2001), d.h. $\sigma_\nu \approx 0$. Damit kann die Gleichung durch Trennung der Variablen gelöst werden, und man erhält das folgende Resultat:

$$\begin{aligned}I(s) &= I(s_0) \cdot e^{-\tau_\nu} \\ \tau_\nu &= \int_{s_0}^s \kappa_\nu \rho ds\end{aligned}\tag{3.7}$$

Dabei wurde in Gleichung 3.7 die optische Tiefe τ_ν für die betrachtete Frequenz ν definiert (Dyson und Williams, 1980). Das Problem des Strahlungstransports ist damit auf eine Pfadintegration zurückgeführt und unmittelbar für die Berechnungen im Kern anwendbar. Für die weiteren Betrachtungen wird dabei die differentielle Intensität J_ν verwendet. Wenn man sich nun an einem beliebigen Punkt im QSCC befindet, trifft aus allen Richtungen entsprechend der Gleichung 3.7 abgeschwächte Strahlung ein. Es ist deshalb vernünftig, eine mittlere differentielle Strahlungsintensität wie folgt zu definieren:

$$J_\nu(r) = \frac{J_\nu^{(is)}}{4\pi} \cdot \int_{\Omega_0} e^{-\tau_\nu(r,\theta)} d\Omega \quad (3.8)$$

Dabei bezeichnet $J_\nu(r)$ jetzt und im Folgenden die mittlere, d.h. effektive Strahlungsintensität im Kern am radialen Punkt r , sowie $J_\nu^{(is)}$ die außerhalb des Kerns vorhandene ungeschwächte Strahlungsintensität (Zucconi et al., 2001). Im Gegensatz zur eindimensionalen Betrachtung muss zur Ableitung der Strahlungsintensität im allgemeinen dreidimensionalen Fall eine Integration über alle im differentiellen Raumwinkel $d\Omega$ eintreffende Strahlung erfolgen. Die optische Tiefe $\tau_\nu(r, \theta)$ ist dabei aufgrund der angenommenen radialen Symmetrie des betrachteten Kerns lediglich eine Funktion des Abstandes zum Zentrum des Kerns r sowie eine Funktion des Winkels mit der kürzesten Verbindungslinie zum Rand des Kerns (Abbildung 3.3). Prinzipiell ist sowohl das Gas (ρ_g) als auch der Staub (ρ_d) für den Verlust an Strahlungsintensität verantwortlich. Es zeigt sich aber, dass bei den für uns relevanten Temperaturen und Dichten die Absorptionsfähigkeit des Gases klein gegenüber der des Staubs ist (Evans et al., 2001; Helling et al., 2000; Marigo und Aringer, 2009; Semenov et al., 2003; Tsuji und Ohnaka, 1995; Zucconi et al., 2001). Deshalb kann die für die Absorption relevante Dichte ρ in Gleichung 3.7 approximativ mit der Staubbichte gleichgesetzt werden, d.h. $\rho = \rho_g + \rho_d \approx \rho_d$. Dies gilt auch unter Berücksichtigung des geringen Massenanteils des Staubs (Zucconi et al., 2001). Die endgültige Form der optischen Tiefe ist im Rahmen unseres Modells damit durch den folgenden Ausdruck gegeben:

$$\tau_\nu(r, \theta) = \kappa_\nu \cdot \int_{\Gamma} \rho_d(s, t) ds \quad (3.9)$$

Die durch κ_ν gegebenen frequenzabhängigen Massenabsorptionskoeffizienten sind als Funktion der Frequenz, d.h. $\kappa_\nu = F(\nu)$, schwer allgemein zu ermitteln und liegen üblicherweise - wie auch in dieser Arbeit - tabellarisch vor, d.h.:

$$\kappa_\nu = \kappa_\nu^{(i)}, \nu_{i,l} \leq \nu \leq \nu_{i,u}, 1 \leq i \leq N \quad (3.10)$$

Dabei bezeichnet $\nu_{i,l}$, $\nu_{i,u}$ den unteren, bzw. oberen tabellarisch vorgegebenen Wert des Frequenzintervalls. Die Werte in dieser Arbeit sind dabei der Arbeit von Ossenkopf und Henning (1994) entnommen, die auch dem Modell von Zucconi et al. (2001) zugrunde liegen. Prinzipiell ist das Problem des Strahlungstransports durch die Lösung der Gleichung 3.8 unter Berücksichtigung der Gleichungen 3.9 bzw. 3.10 vollständig gelöst. Anhand eines für die Berechnung der Gas- und Staubtemperaturen erforderlichen Integrals $I(r)$, soll im Folgenden die praktische

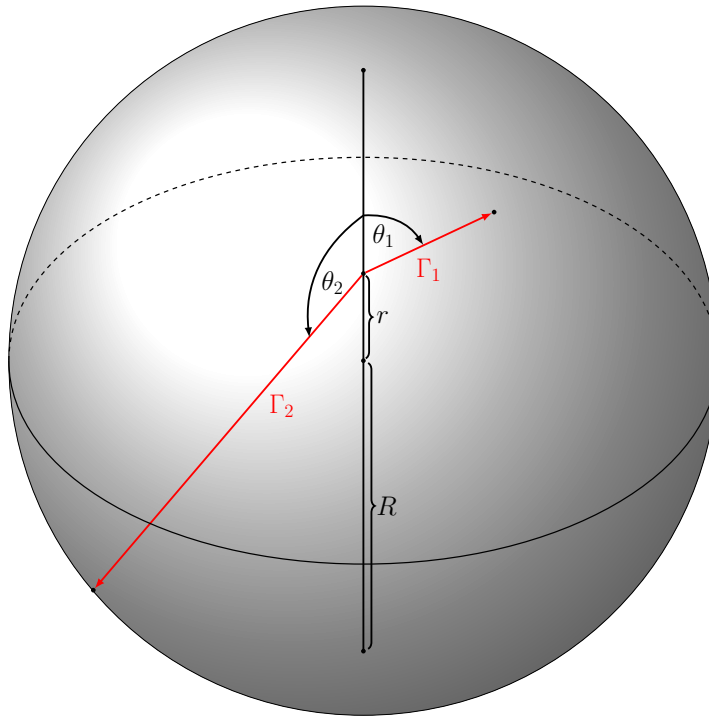


Abbildung 3.3: Ausgewählte optische Pfade für ein Staubkorn, das sich in radialer Entfernung r vom Kernzentrum befindet - Die Abbildung zeigt zwei ausgewählte Pfade mit Winkel θ_1, θ_2 . Die Gesamtheit dieser Pfade bestimmt die Strahlungsintensität am Ort r des Kerns durch Absorption der Strahlung durch die sich auf diesen Pfaden befindenden Körnern.

Lösung des durch die Gleichungen 3.8, 3.9 und 3.10 definierten Problems des Strahlungstransports erläutert werden. Die Kennzeichnung der Absorptionsfähigkeit eines Staubkorns ist dabei durch seine frequenzabhängige Absorptionseffizienz Q_ν gegeben. Mithilfe der durch Gleichung 3.8 definierten Strahlungsintensität J_ν ist damit die effektiv auf das Korn wirkende Intensität durch das folgenden Integral gegeben:

$$I(r) = \int_0^\infty Q_\nu J_\nu(r) d\nu \quad (3.11)$$

Bei der konkreten Berechnung des Integrals ergibt sich das Problem, dass die *kontinuierliche* frequenzabhängige Strahlungsintensität $J_\nu(r)$ über die Gleichung 3.8 von der optischen Tiefe τ_ν abhängt, die wiederum von den *diskret* tabellarisch vorliegenden Massenabsorptionskoeffizienten abhängt. Aus diesem Grunde muss ein Ansatz gefunden werden, welcher eine Berechnung der Integrale des durch Gleichung 3.11 gegebenen Typs mithilfe der tabellarisch vorliegenden Werte ermöglicht. Mithilfe der bekannten Absorptionseffizienz Q_ν lässt sich die Gleichung 3.11

wie folgt umformen:

$$I(r) = \int_0^\infty Q_\nu J_\nu(r) d\nu = \sum_{i=1}^N \left(\int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu(r) d\nu \right) \quad (3.12)$$

Das für ein Intervall vorgegebene rechts stehende Integral $\int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu(r) d\nu$ lässt sich unter Berücksichtigung der Definition der Funktion $J_\nu(r)$ wie folgt ausdrücken:

$$\begin{aligned} \int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu(r) d\nu &= \frac{1}{4\pi} \int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} \int_{\Omega_0} Q_\nu J_\nu^{is} \cdot e^{-\tau_\nu(r,\theta)} d\Omega d\nu \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu^{is} \cdot e^{-\tau_\nu(r,\theta)} d\nu d\Omega \end{aligned} \quad (3.13)$$

Wie aus der Definition der optischen Tiefe (Gleichung 3.9) ersichtlich ist, handelt es sich bei dieser Gleichung um eine verschachtelte dreifache Integration. Diese Kopplung entsteht einzig über die optische Tiefe $\tau_\nu(r, \theta)$ und hat den Nachteil, dass das *nicht* zeitabhängige Produkt $Q_\nu J_\nu^{is}$ bei jeder Auswertung des Integrals mit evaluiert werden muss. Aufgrund der nur tabellarisch gegebenen Massenabsorptionskoeffizienten κ_ν ist die optische Tiefe (Gleichung 3.9) ebenfalls nur tabellarisch strikt definiert, so dass das Produkt

$$Q_\nu J_\nu^{is} \cdot e^{-\tau_\nu(r,\theta)} \quad (3.14)$$

auf dem Intervall $[\nu_{i,l}, \nu_{i,u}]$ in geeigneter Art und Weise numerisch approximiert werden muss. Der einfachste Ansatz wäre durch die Verwendung einer Stufenfunktion gegeben:

$$\begin{aligned} Q_\nu J_\nu^{is} \cdot e^{-\tau_\nu(r,\theta)} &\approx Q_\nu J_\nu^{is} \cdot e^{-\tau_\nu^{(i)}(r,\theta)} \\ \tau_\nu^{(i)}(r, \theta) &= \kappa_\nu^{(i)} \cdot \int_\Gamma \rho_d(s, t) ds \end{aligned} \quad (3.15)$$

Die so gegebene Diskretisierung besitzt neben einer geringeren Genauigkeit auch den Nachteil, dass die verwendete Romberg-Integration (Press et al., 2007) auf einer Extrapolation beruht und somit für solche Integranden (Gleichung 3.15) nicht optimal ist. Um eine höhere Genauigkeit der Romberg-Integration und eine schnellere Konvergenz sowie eine bessere Approximation des Integranden zu erreichen, wird deshalb eine andere Approximation des Integranden (Gleichung 3.14) gewählt:

$$\begin{aligned} Q_\nu J_\nu^{is} \cdot e^{-\tau_\nu(r,\theta)} &\approx Q_\nu J_\nu^{is} \cdot \left(e^{-\tau_\nu^{(i)}(r,\theta)} + F(\nu) \cdot \left(e^{-\tau_\nu^{(i+1)}(r,\theta)} - e^{-\tau_\nu^{(i)}(r,\theta)} \right) \right) \\ \tau_\nu^{(k)}(r, \theta) &= \kappa_\nu^{(k)} \cdot \int_\Gamma \rho_d(s, t) ds \end{aligned} \quad (3.16)$$

Dabei ist $F(\nu)$ eine monotone, auf das Wertintervall $[0, 1]$ beschränkte, sonst aber beliebige Funktion mit den zwei Randwerten $F(\nu_{i,l}) = 0$ bzw. $F(\nu_{i,u}) = 1$. Die einfachste Gestalt,

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

welche die funktionale Abhängigkeit der Massenabsorptionskoeffizienten κ_ν erhalten kann, ist eine lineare Approximation, so dass die Funktion $F(\nu)$ die folgenden Gestalt erhält:

$$F(\nu) = \frac{\nu - \nu_{i,l}}{\nu_{i,u} - \nu_{i,l}} \quad (3.17)$$

Mithilfe der so definierten Approximation lässt sich Gleichung 3.13 in eine Form bringen, in der man die zeitabhängigen und nicht-zeitabhängigen Teile des Integranden trennen kann. Durch Einsetzen der Gleichung 3.16 in Gleichung 3.13 erhält man die folgende Gleichung:

$$\begin{aligned} \int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu(r) d\nu &= \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu^{is} \cdot e^{-\tau_\nu(r,\theta)} d\nu d\Omega \\ &\approx \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu^{is} \cdot \left(e^{-\tau_\nu^{(i)}(r,\theta)} + F(\nu) \cdot \left(e^{-\tau_\nu^{(i+1)}(r,\theta)} - e^{-\tau_\nu^{(i)}(r,\theta)} \right) \right) d\nu d\Omega \\ &= \left(\int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu^{is} d\nu \right) \cdot \left(\frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} e^{-\tau_\nu^{(i)}(r,\theta)} d\Omega \right) \\ &\quad + \left(\int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu^{is} F(\nu) d\nu \right) \cdot \left(\frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} \left(e^{-\tau_\nu^{(i+1)}(r,\theta)} - e^{-\tau_\nu^{(i)}(r,\theta)} \right) d\Omega \right) \end{aligned} \quad (3.18)$$

Die so entstandene Trennung der zeitabhängigen und nicht-zeitabhängigen Teile der Gleichung 3.13 ermöglicht eine um ein Vielfaches (in der Praxis etwa ein Faktor ≈ 10) schnellere Berechnung der Integrale des Typs der Gleichung 3.12. Um dies übersichtlich darzustellen, werden die folgenden Abkürzungen eingeführt:

$$\begin{aligned} A_i &= \int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu^{is} d\nu \\ B_i &= \int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu^{is} F(\nu) d\nu \\ C_i &= \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega_0} e^{-\tau_\nu^{(i)}(r,\theta)} d\Omega \end{aligned} \quad (3.19)$$

Mithilfe der in Gleichung 3.19 definierten Abkürzungen kann man Gleichung 3.18 eine übersichtlichere Form geben:

$$\int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu(r) d\nu = A_i \cdot C_i + B_i \cdot (C_{i+1} - C_i) \quad (3.20)$$

Die Terme A_i , sowie B_i sind dabei zeitunabhängig und werden nur bei der Initialisierung der Berechnung des Strahlungstransports benötigt. Die Terme C_i sind zeitabhängig, da die zu ihrer Berechnung benötigte Staubdichte ρ_d zeitabhängig ist. Durch Einsetzen der Gleichung 3.20 in

Gleichung 3.12 erhält man einen analogen Ausdruck für die Integrale des Typs $I(r)$:

$$\begin{aligned} I(r) &= \int_0^\infty Q_\nu J_\nu(r) d\nu = \sum_{i=1}^N \left(\int_{\nu_{i,l}}^{\nu_{i,u}} Q_\nu J_\nu(r) d\nu \right) \\ &= \sum_{i=1}^{N-1} (A_i \cdot C_i + B_i \cdot (C_{i+1} - C_i)) + A_N \cdot C_N \end{aligned} \quad (3.21)$$

Der letzte Term $A_N \cdot C_N$ ist dabei dadurch entstanden, dass für die Approximationen des Intervalls, welches den letzten tabellarisch vorgegebenen Wert (Gleichung 3.10) enthält, $F(\nu) \equiv 0$ gilt. Der Strahlungstransport für einen Kern, der optisch dünn für seine eigene emittierende Strahlung ist (Evans et al., 2001; Zucconi et al., 2001), ist damit vollständig beschrieben. Zur Berechnung des Strahlungstransports benötigt man noch einen Formalismus für die Berechnung der optische Tiefe, Gleichung 3.9. Im nächsten Abschnitt wird demonstriert werden, dass sich auch in diesem Fall stabile und genaue Approximationen ermitteln lassen.

3.4.1 Berechnung der Pfadintegrale

Wie im vorhergehenden Abschnitt gezeigt wurde, ist die Berechnung der Pfadintegrale für die Ermittlung des am Ort r vorhandenen Strahlungsfeldes $J_\nu(r)$ notwendig. Dazu gilt es, die Form des Pfadintegrals kurz zu rekapitulieren (Gleichung 3.9):

$$\tau_\nu(r, \theta) = \kappa_\nu \cdot \int_\Gamma \rho_d(s, t) ds \quad (3.22)$$

Hierbei ist Γ der Pfad vom Ort r zum Rand des Kerns unter dem Winkel θ zur kürzesten Verbindungslinie (vgl. Abbildung 3.4). Die Berechnung eines solchen skalaren Pfadintegrals geschieht über eine geeignete Parametrisierung (Bronstein et al., 2005):

$$\tau_\nu(r, \theta) = \kappa_\nu \cdot \int_\Gamma \rho_d(s, t) ds = \kappa_\nu \cdot \int_0^{p_m} \rho_d(r(p), t) \cdot \left| \frac{d\gamma}{dp}(p) \right| dp \quad (3.23)$$

In diesem nun gewöhnlichen Integral bezeichnet $\gamma(p)$ den mithilfe des Parameters p parametrisierten Pfad zum Rand des Kerns. In dieser Arbeit wird analog zu Zucconi et al. (2001) eine Parametrisierung des Pfades mithilfe der durch Kugelkoordinaten gegebenen Einheitsvektoren durchgeführt, wie in Abbildung 3.4 schematisch dargestellt ist:

$$\gamma(p) = r \cdot \mathbf{e}_z + p \cdot \mathbf{e}_\theta, \quad 0 \leq p \leq p_m \quad (3.24)$$

dabei lässt sich der Parameter p_m dadurch ermitteln, dass der Durchstoßungspunkt des Pfades (vgl. Abbildung 3.4) Element der Oberfläche des Kerns sein muss. Diese Bedingung führt

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

Mithilfe des bekannten Kernradius R_c auf eine quadratische Gleichung für den Parameter p_m :

$$\begin{aligned}
 R_c &= |r \cdot \mathbf{e}_z + p_m \cdot \mathbf{e}_\theta| \\
 &= \sqrt{r^2 + 2rp_m \cdot \cos(\theta) + p_m^2} \\
 0 &= p_m^2 + 2rp_m \cdot \cos(\theta) + r^2 - R_c^2 \\
 p_m &= -r \cdot \cos(\theta) + \sqrt{r^2 \cdot \cos(\theta)^2 - (r^2 - R_c^2)} \\
 p_m &= \sqrt{R_c^2 - r^2 \cdot \sin(\theta)^2} - r \cdot \cos(\theta)
 \end{aligned} \tag{3.25}$$

Mithilfe der so gewonnenen Parametrisierung des Pfades muss nun eine effiziente Methode

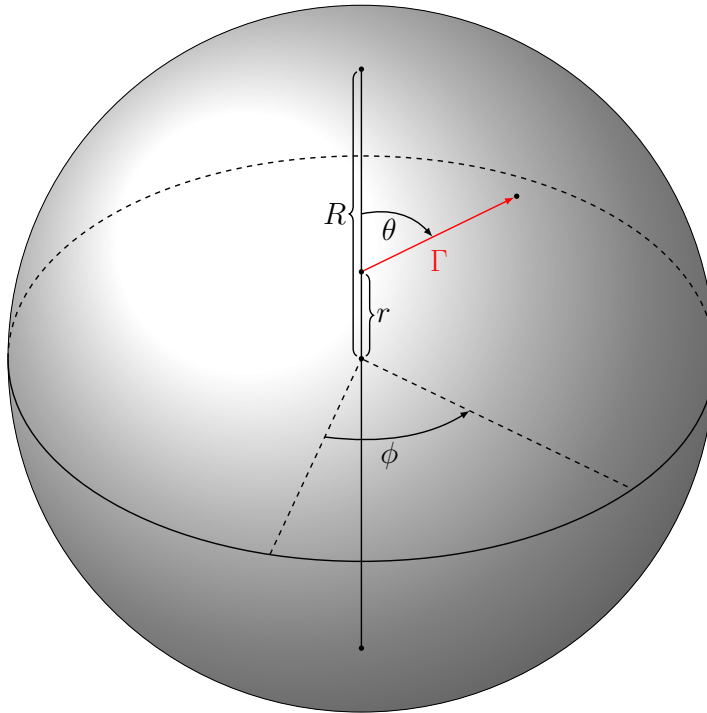


Abbildung 3.4: Zur Parametrisierung eines optischen Pfades zwecks Berechnung des Pfadintegrals - Der in der Abbildung skizzierte optische Pfad lässt sich durch Anwendung von Kugelkoordinaten geeignet parametrisieren. Die Richtung eines Pfades ist dabei durch den Einheitsvektor $\mathbf{e}_\theta(r, \theta, \phi)$ gegeben. Aufgrund der vorliegenden sphärischen Symmetrie genügt es, einen beliebigen Winkel ϕ für die Parametrisierung auszuwählen

gefunden werden, um das Pfad-Integral, Gleichung 3.23, auszuwerten. Dabei gilt es zu beachten, dass die Staubbichte ρ_d nur zu Beginn der Simulation an beliebigen radialen Punkten zur Verfügung steht, so dass für spätere Berechnungen natürlich auf das definierte radiale Gitter zurückgegriffen werden muss. In dieser Arbeit werden zwei verschiedene Methoden untersucht, um die Berechnung des Pfadintegrals für einen beliebigen Pfad durchzuführen. Die beiden Me-

thoden basieren auf einer Interpolation der Gitterwerte $\rho_d^{(i)}(t) = \rho_d(r_i, t)$ auf radialen Gitterpunkten r_i bzw. auf einer partiellen Pfad-Approximation im radialen Gitter. Zum Testen der Genauigkeit der Verfahren wird dabei ein Testfall von Zucconi et al. (2001) benutzt. Die Dichte des Staubs ist in dem gegebenen Testfall konstant $\rho_d(r, t) \equiv \rho_0$. Da in der gegebenen Parametrisierung (Gleichung 3.24) der Tangentialvektor ein Einheitsvektor ist ($\left| \frac{d\gamma}{dp}(p) \right| \equiv 1$), lässt sich das Ergebnis des Pfadintegrals in diesem Fall leicht angeben:

$$\begin{aligned} \tau_\nu(r, \theta) &= \kappa_\nu \cdot \int_0^{p_m} \rho_d(r(p), t) \cdot \left| \frac{d\gamma}{dp}(p) \right| dp \\ &= \kappa_\nu \cdot \rho_0 \cdot \int_0^{p_m} dp \\ &= \kappa_\nu \cdot \rho_0 \cdot \left(\sqrt{R_c^2 - r^2 \cdot \sin(\theta)^2} - r \cdot \cos(\theta) \right) \end{aligned} \quad (3.26)$$

Analog dem Vorschlag in Zucconi et al. (2001) wird jedoch nicht die Genauigkeit getestet, mit der Gleichung 3.26 numerisch berechnet werden kann, sondern stattdessen die numerische Genauigkeit überprüft, mit der sich Gleichung 3.8 erfüllen lässt. Der Grund liegt darin, dass durch die stark nichtlineare Abhängigkeit von $\tau_\nu(r, \theta)$ speziell im Zentrum des Kerns Integrale entstehen, die nur wenig von Null verschieden sind. Bei einer nicht-stabilen Integration wären hier negative Werte möglich, die für die weiteren algorithmischen Schritte (die die Lösung der Gleichung 3.8 erfordern) fatal wären. Beim Einsetzen des exakten Ausdrucks für die optische Tiefe, Gleichung 3.26, in Gleichung 3.8, für die Abschwächung der in den Kern gelangenden Strahlung, ergibt sich der folgende Ausdruck:

$$J_\nu(r) = \frac{J_\nu^{(is)}}{4\pi} \cdot \int_{\Omega_0} \exp \left(-\kappa_\nu \cdot \rho_0 \cdot \left(\sqrt{R_c^2 - r^2 \cdot \sin(\theta)^2} - r \cdot \cos(\theta) \right) \right) d\Omega \quad (3.27)$$

Durch die Substitutionen $x = r/R_c$ sowie $\eta = \sqrt{1 - x^2 \cdot \sin(\theta)^2} - x \cdot \cos(\theta)$ und $\tau_0 = \kappa_0 \rho_0 R_c$ lässt sich das so entstandene Integral in die folgenden Gestalt bringen (Zucconi et al., 2001):

$$J_\nu(x) = \frac{J_\nu^{(is)}}{4\pi} \left((1 - x^2) \cdot \int_{1-x}^{1+x} \frac{e^{-\tau_0 \eta}}{\eta^2} d\eta + \int_{1-x}^{1+x} e^{-\tau_0 \eta} d\eta \right) \quad (3.28)$$

Diese Integrale wiederum lassen sich durch Einführung der Exponential-Integral Funktion $E_n(x)$ sowie der Variablen $x_\pm = (1 \pm x)$ in eine geschlossene Form bringen, die hier ohne weitere Ableitung angegeben wird (vgl. ggf. Zucconi et al., 2001):

$$\begin{aligned} J_\nu(x) &= \frac{J_\nu^{(is)}}{2(x_+ - x_-)} (x_+ E_2(x_-) - x_- E_2(x_+) + x_- E_0(x_-) - x_+ E_0(x_+)) \\ E_n(x) &\equiv \int_0^\infty y^{-n} \cdot e^{-xy} dy \end{aligned} \quad (3.29)$$

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

Das Verfahren zur Berechnung der Funktion $E_n(x)$ ist dabei Zhang und Jin (1996) entnommen¹. Mithilfe der so vorliegenden analytischen Lösung lassen sich nun beide Verfahren testen. Statt der expliziten Form $J_\nu(x)$ wird dabei im Folgenden die Abschwächung der Strahlung $A_\nu(x) \equiv J_\nu(x)/J_\nu^{(is)}$ untersucht. Zudem wird im Folgenden das Frequenzband mit dem größten Massenabsorptionskoeffizienten κ_0 und damit auch mit der größten implizierten Nichtlinearität (Gleichungen 3.26, 3.27) verwendet.

3.4.2 Interpolation der Gitterwerte

Die Interpolation der vorhandenen Gitterwerte ist der naheliegendste Ansatz für die Auswertung der Dämpfung der Strahlung im Kern (Gleichung 3.8). Analog zum Vorgehen in Abschnitt 3.4 wäre eine Interpolation der Staubbichte $\rho_d^{(i)}(t) = \rho_d(r_i, t)$ auf dem Gitter mithilfe linearer Funktionen möglich. Aufgrund der auch in der dynamischen Entwicklung vorhandenen hinreichenden Glattheit der Funktion bietet sich jedoch eine Interpolation mithilfe kubischer Splinefunktionen an. Zu diesem Zweck ist in dieser Arbeit auf die Routinen zur Spline-Interpolationen in Press et al. (2007) (unter Verwendung sogenannter natürlicher Randbedingungen, d.h. verschwindenden Ableitungen zweiter Ordnung an den Randpunkten) zurückgegriffen worden. Der Vorteil der Anwendung lag darin, dass die Tabellierung der Koeffizienten der Spline-Interpolation *einmalig* vorgenommen werden kann, um sie danach vielfach bei der Pfadintegration zu benutzen. Das heißt, mit jedem Aufruf der Funktion $\rho_d(r)$ wird dann die entsprechende Interpolation mithilfe der vorliegenden Koeffizienten durchgeführt. Natürlich muss die Tabellierung nach einer erfolgten Bewegung des Staubs neu berechnet werden. Zudem muss bei jeder Interpolation der passende tabellierte Wertebereich ausgewählt werden, was ebenso wie die Tabellierung bei gut aufgelösten Modellen mit ≈ 300 Zellen und hunderten Schritten, die zur expliziten Integration der Staubbichte notwendig sind, einen großen Anteil am numerischen Aufwand zur Folge hat. Der Vorteil der Methode liegt darin, dass sie durch die Interpolation den zugrunde liegenden Verlauf der Dichtefunktion weit besser repräsentieren kann als die im nächsten Abschnitt präsentierte partielle Pfad-Approximation. Zudem geschieht die Berechnung des Pfad-Integrals in expliziter Form. Um abzuwägen, welche Methode für die Berechnung der Bewegung des Staubs bzw. die Berechnung der physikalischen Bedingungen im Kern vorteilhafter ist, werden zwei verschiedene Tests angewandt. Zum Ersten wird die Berechnung der Abschwächung der Strahlung in einem QSCC mit einem konstanten Dichteprofil mit den entsprechend analytisch erhaltenen Resultaten verglichen. Im zweiten Test wird ein Plummer-Profil, welches bei der Behandlung des Modelles für die Bewegung des Staubs (Whitworth und Bate, 2002) zugrunde gelegt wird, verwendet. Die Berechnung des Pfad-Integrals (Gleichung 3.22) ist in diesem Falle ebenfalls in expliziter Weise möglich. Das Ergebnis dieses zweiten Tests wird gesondert im Abschnitt 3.4.4 behandelt. Das Resultat der numerischen Auswertung des Integrals mithilfe der Methode der Interpolation der Gitterwerte im Vergleich zu der gemäß Gleichung 3.29 vorliegenden analytischen Berechnung ist in Abbildung 3.5 zu sehen. Dabei ist

¹Eine entsprechende in Fortran geschriebene Routine ist auf der Webseite des Autors <http://jin.ece.uiuc.edu/routines/routines.html> zu finden und auch in dieser Arbeit verwendet worden.

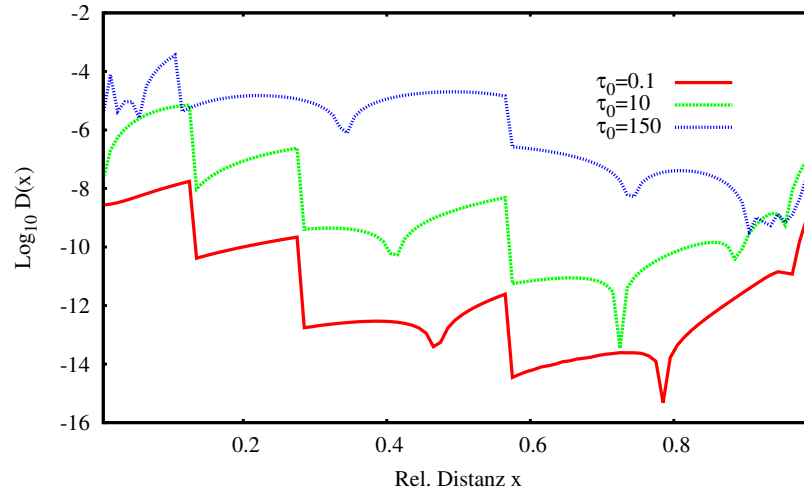


Abbildung 3.5: Relative Übereinstimmung der mithilfe der Interpolation ermittelten Lösung

- In der Abbildung ist der Vergleich der numerischen Lösung der Abschwächungsfunktion $A_\nu^{(n)}(x)$ zur theoretisch berechneten (Gleichung 3.29) $A_\nu^{(t)}(x)$ zu sehen. Dargestellt ist die relative Abweichung $D(x) \equiv |A_\nu^{(n)}(x) - A_\nu^{(t)}(x)| / A_\nu^{(t)}(x)$ von der theoretischen Lösung als Funktion der relativen Entfernung $x = r/R_c$ vom Kernzentrum für drei verschieden dichte Kerne, charakterisiert durch den Parameter τ_0 , der in Gleichung 3.27 definiert wurde.

der Vergleich für verschieden dichte Kerne durchgeführt.

3.4.3 Partielle Pfad-Approximation

Die zugrunde liegende Idee der partiellen Pfad-Approximation (Abbildung 3.6) fußt darauf, dass jeder optische Pfad durch den Kern in Teilpfade zerlegt werden kann. Für die Auswertung der Integrale, die zur Berechnung der Dämpfung der Intensität des Strahlungsfeldes notwendig sind, ist insbesondere eine Zerlegung in Teilpfade $\Gamma^{(i)}$ hilfreich, die innerhalb jeweiliger radialer Schalen S_i liegen. Diese Pfade sind in Abbildung 3.6 gezeigt und für verschiedene Schalen verschiedenfarbig markiert. Für einen solchen Teilpfad lässt sich das Pfad-Integral als Produkt aus Dichte und Pfadlänge approximieren: $\int_{\Gamma^{(i)}} \rho_d(s, t) ds \approx s^{(i)} \cdot \rho_d^{(i)}$. Die Pfadlänge, die ein Pfad in einer Schale besitzt, lässt sich dabei mithilfe der expliziten Parametrisierung des Pfades in der Wolke leicht berechnen, da die Größe der radialen Schalen bekannt ist. Dabei sind zwei Fälle zu unterscheiden: falls $\theta \leq \frac{\pi}{2}$, durchläuft der Pfad inklusive der Schale, in welcher er beginnt, lediglich Schalen mit größerem Index. Falls andererseits $\theta > \frac{\pi}{2}$, kann der Pfad auch Schalen mit kleinerem Index durchlaufen und die Summierung muss gegebenenfalls auch die entsprechenden Schalen umfassen. Diese Situation ist in Abbildung 3.6 für zwei verschiedene Sichtwinkel θ_1, θ_2 veranschaulicht, wobei jeweils ein Pfad eine der beiden beschriebenen Situationen veranschaulicht, d.h. es gilt $\theta_1 \leq \frac{\pi}{2}$ bzw. $\theta_2 > \frac{\pi}{2}$. Um nun einen effizienten Algorithmus zu formulieren, ist es vorteilhaft, Pfade, für die $\theta > \frac{\pi}{2}$ gültig ist, in zwei Teilpfade aufzuteilen. Dazu trennt man den Pfad an der Stelle, an der die Minimaldistanz zum Zentrum des Kerns

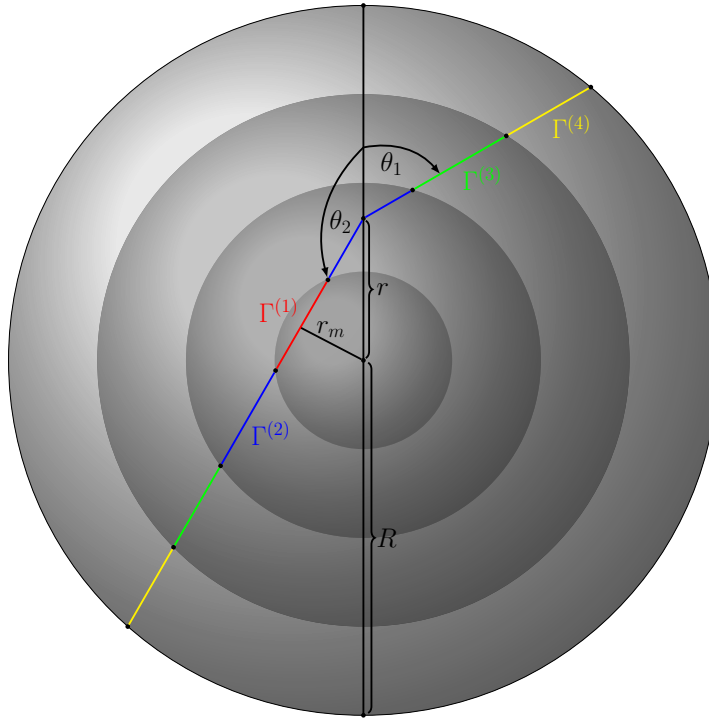


Abbildung 3.6: Schematische Darstellung der Methode der partiellen Pfad-Approximation -

Die Abbildung veranschaulicht die Berechnung der Pfadintegrale anhand zweier repräsentativer Pfade, wobei je ein Pfad für einen der charakteristischen Fälle $\theta \leq \frac{\pi}{2}$ bzw. $\theta > \frac{\pi}{2}$ ausgewählt wurde. Das Pfadintegral lässt sich als Summe aus Pfaden ermitteln, in welchen die Dichte näherungsweise als konstant angenommen werden kann. Die Bedeutung der Parameter ist im Text erläutert.

erreicht ist. Die so entstandenen Teilpfade sind jeweils für sich dem Fall $\theta \leq \frac{\pi}{2}$ analog. Der Algorithmus lässt sich damit zusammenfassend wie folgt formulieren:

$$\begin{aligned}
 \int_{\Gamma} \rho_d(s, t) ds &= \sum_i \int_{\Gamma^{(i)}} \rho_d(s, t) ds \\
 \int_{\Gamma^{(i)}} \rho_d(s, t) ds &\approx s^{(i)} \cdot \rho_d^{(i)} \\
 \int_{\Gamma} \rho_d(s, t) ds &\approx \begin{cases} \sum_{i=is}^N s^{(i)} \cdot \rho_d^{(i)} & : \theta \leq \frac{\pi}{2} \\ \sum_{i=is}^{im} s^{(i)} \cdot \rho_d^{(i)} + \sum_{i=im+1}^N s^{(i)} \cdot \rho_d^{(i)} + s^{(im)} \cdot \rho_d^{(im)} & : \theta > \frac{\pi}{2} \end{cases} \quad (3.30)
 \end{aligned}$$

Dabei ist is der Index der Schale, in welcher sich das Staubkorn befindet, und im der Index der Schale, in der die Minimaldistanz zum Kern erreicht ist. Es ist vollkommen klar, dass man durch die Approximation des Pfadintegrals in dieser Art und Weise Genauigkeit gegenüber dem Ansatz mithilfe der Interpolation der Gitterwerte einbüßt. Andererseits zeigt die praktische numerische Auswertung, dass der so geschilderte Algorithmus um etwa einen Faktor $\approx 6 - 7$ effizienter und damit auch schneller im Vergleich zur vorher geschilderten Methode der Inter-

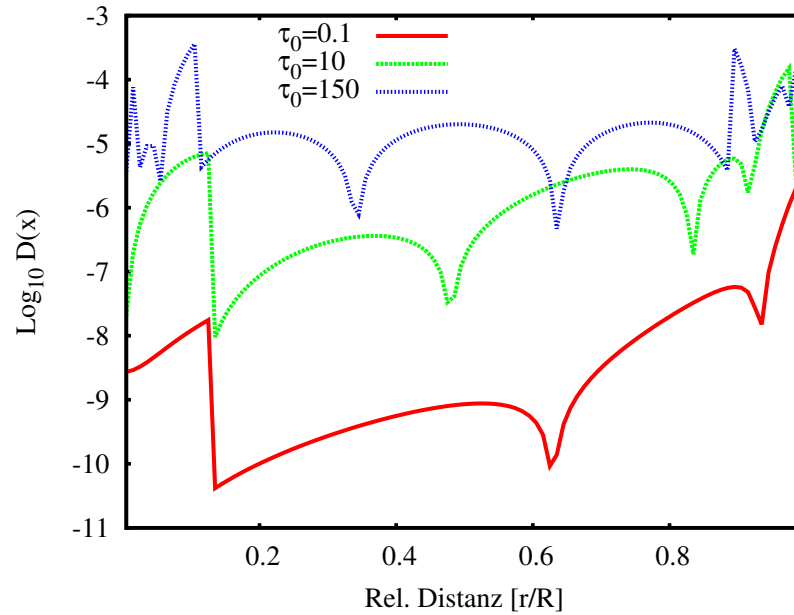


Abbildung 3.7: Relative Übereinstimmung der mithilfe der partiellen Pfad-Approximation ermittelten Lösung - In der Abbildung ist der Vergleich der numerischen Lösung der Abschwächungsfunktion $A_\nu^{(n)}(x)$ zur theoretisch berechneten (Gleichung 3.29) $A_\nu^{(t)}(x)$ zu sehen. Dargestellt ist die relative Abweichung $D(x) \equiv |A_\nu^{(n)}(x) - A_\nu^{(t)}(x)|/A_\nu^{(t)}(x)$ von der theoretischen Lösung als Funktion der relativen Entfernung $x = r/R_c$ vom Kernzentrum für drei verschieden dichte Kerne, charakterisiert durch den Parameter τ_0 , der in Gleichung 3.27 definiert wurde.

polution der Gitterwerte ist. Es bleibt also zu beurteilen, ob die Methode eine hinreichende Genauigkeit besitzt. Die Abbildung 3.7 zeigt einen Vergleich der numerisch ermittelten Lösung mit der exakten Lösung, analog zu der Methode der Interpolation der Gitterwerte. In der Abbildung, bei der analog zum vorhergehenden Fall 300 radiale Schalen verwendet worden sind, ist zu erkennen, dass der Genauigkeitsverlust gegenüber der Methode, welche die Interpolation der Gitterwerte verwendet, relativ gering ist. Weiterhin ist zu beachten, dass die Unsicherheiten, die mit dem noch vorzustellenden Temperaturmodell assoziiert sind (Goldsmith, 2001; Zucconi et al., 2001), die Abweichungen überschreiten, die durch die Verwendung der partiellen Pfad-Approximation entstehen. Ferner ist zu bemerken, dass (wie sich noch zeigen wird) der Faktor an Rechenzeit von $\approx 6 - 7$, den man mithilfe der vorgestellten Methodik gewinnt, äußerst wertvoll für die adaptive Anpassung der Gaskonfiguration ist.

3.4.4 Vergleich der beiden Methoden anhand des Dämpfungsintegrals für die Staubbewegung

Die Bewegung des Staubs wird Gegenstand des Abschnittes 3.10 sein. Wie in dem Abschnitt erläutert wird, ist der Strahlungsdruck ursächlich für die Bewegung des Staubs (Whitworth und Bate, 2002). Völlig analog zu den vorhergehenden Abschnitten ist der Strahlungstransport auch

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

für die Bewegung der Staubkörner bedeutsam. Das für die Bewegung relevante Integral besitzt einen ähnlichen Typus wie das zur Ableitung der mittleren Intensität benötigte (Gleichung 3.8). Das Integral besitzt die folgende Gestalt (Whitworth und Bate, 2002):

$$D(x) = 2 \int_{-1}^1 e^{-\tau_f(x,\chi)} \chi d\chi \quad (3.31)$$

Dabei ist τ_f eine für die Staubbewegung charakteristische optische Tiefe, die gemäß Gleichung 3.9 bei einer charakteristischen Frequenz berechnet wird, $x = r/R_c$ die relative Distanz zum Zentrum des Kerns, und es wurde abkürzend $\chi = \cos(\theta)$ gesetzt. Wie im vorhergehenden Abschnitt stellt sich nun die Frage nach der Konvergenz beider Methoden, die zur numerischen Lösung der Gleichung 3.9 und somit auch der Gleichung 3.31 verwendet werden können. Die Gleichung 3.31 besitzt dabei einen anderen numerischen Charakter als die Gleichung 3.8. Insbesondere gilt $D(0) \equiv 0$ für beliebige radiale Profile $\rho_d(r)$, da im Zentrum des Kerns optische Pfade in jeder Richtung identisch sind. Der von mir untersuchte Testfall ist Whitworth und Bate

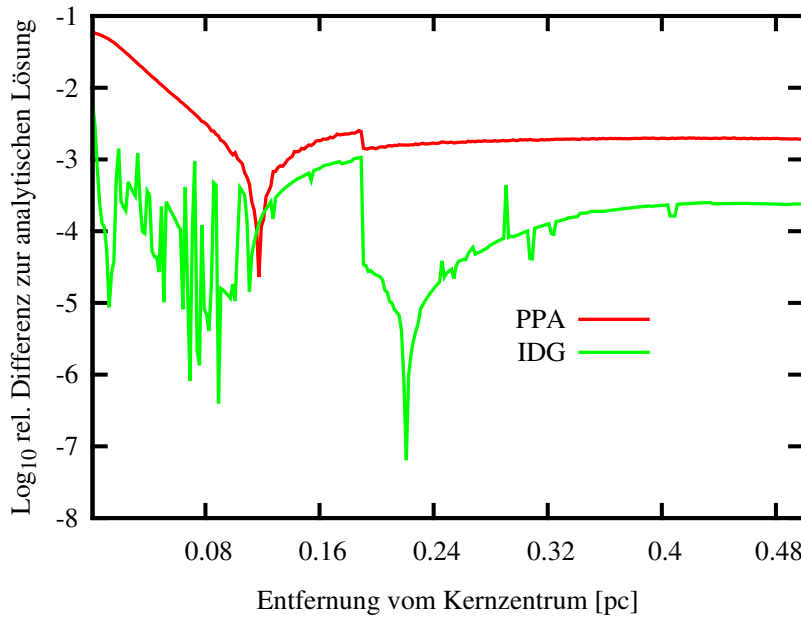


Abbildung 3.8: Vergleich der numerisch erhaltenen Resultate der Gleichung 3.31 mit dem theoretischen Resultat - Die Abbildung zeigt den Vergleich der numerischen Auswertung der Gleichung 3.31 mit der Methode der Interpolation der Gitterwerte (in der Abbildung abgekürzt mit IDG) sowie der Methode der partiellen Pfad-Integration (abgekürzt mit PPA). Gezeigt ist eine Simulation mit der in dieser Arbeit verwendeten Auflösung von 300 Zellen, welche eine hinreichend gute Konvergenz zu den theoretischen Resultaten besitzt.

(2002) entnommen und wird auch bei der Ableitung der Bewegungsgleichung der Staubkörner benutzt werden, was Gegenstand des Abschnittes 3.10 ist. Das dabei verwendete radiale Profil

$\rho_d(r)$ ist ein Plummer-Profil (Plummer, 1911):

$$\rho_d(r) = \rho_{d,0} \cdot \frac{R_0^2}{r^2 + R_0^2} \quad (3.32)$$

Dabei sind $\rho_{d,0}$ und R_0 empirische Konstanten, deren Werte Whitworth und Bate (2002) entnommen sind. Im Gegensatz zum Profil, das man infolge der Anwendung des hydrostatischen Gleichgewichts erhält, ist das Integral für den optische Pfad τ_f nach Gleichung 3.32 in geschlossener Form lösbar und kann analytisch angegeben werden (siehe ggf. Whitworth und Bate, 2002). Die Auswertung des Integrales 3.31 geschieht dann analog zu den vorhergehenden Abschnitten und erlaubt es, die numerisch mithilfe beider Methoden ermittelten Lösungen miteinander zu vergleichen. Das Resultat dieses Vergleiches ist in Abbildung 3.8 zu sehen. Wie erwartet, ist die Konvergenz bei der Verwendung der partiellen Pfad-Integration im Zentrum des Kerns schlechter als es im vorherigen Testfall der Fall war. Wie im Abschnitt 3.10 noch zu sehen sein wird, gilt für die Kraft $F(x)$, die auf ein Korn infolge des Strahlungsdrucks hervorgerufen wird, $F(x) \propto D(x)$. In der Nähe des Zentrums eines QSCC, für das unabhängig von der Konfiguration der Dichte $D(x) \approx 0$ gilt, ist demzufolge auch die auf das Korn wirkende Kraft $F(x) \approx 0$. Dieses wiederum hat zur Folge, dass die geringere Genauigkeit der partiellen Pfad-Approximation im Kernbereich für die quantitative Lösung der Bewegungsgleichung der Staubkörner bei der gezeigten Konvergenzrate akzeptabel ist. Berücksichtigt man den Gewinn an Rechenzeit, den man mit der Methode der partiellen Pfad-Approximation gewinnen kann, ist diese der Methode der Interpolation der Gitterwerte vorzuziehen. Dies gilt umso mehr, wenn man die adaptive Anpassung der Gaskonfiguration mitberücksichtigt.

3.5 Die Größenverteilung der Staubkörner

Staubkörner sind Produkte vielfacher Wechselwirkungen in turbulenten stellaren Winden (Dirks et al., 2008). Dieser Entstehungsgeschichte haben sie auch ihre komplexe chemische Struktur zu verdanken, und insbesondere bedeutet es auch, dass die Staubkörner eine Größenverteilung besitzen. Diese Größenverteilung ist hier interessant, da sie die chemische Entwicklung zu beeinflussen vermag, wie in späteren Abschnitten noch zu sehen sein wird. Zudem wird die Größenverteilung einen starken Einfluss auf die Temperaturverteilung besitzen, was im nächsten Abschnitt von Bedeutung ist. Aufgrund der Komplexität des Entstehungsprozesses werden Modelle angewandt, die auf Beobachtungen fußen (Draine, 2003). Diese Beobachtungen erlauben es, qualitative Modelle für Staubgrößenverteilungen (Li und Greenberg, 1997; Mathis et al., 1977; O'Donnell und Mathis, 1997) zu definieren. Diese besitzen oft eine Struktur, die einem Potenzgesetz entspricht, d.h. die Verteilung $f(r_d)$ der Staubgrößen lässt sich folgendermaßen darstellen: $f(r_d) \propto r_d^{-\alpha}$. Aus den Modellen, die in der Literatur zu finden sind, sind für diese Arbeit zwei ausgewählt worden: Zum ersten wird es sich dabei um eine leicht modifizierte Mathis-Rumpl-Nordsieck (MRN) Größenverteilung (Mathis et al., 1977) handeln, die Pollack et al. (1985) entnommen wurde, und die im folgenden auch mit MRN bezeichnet wird. Diese Verteilung setzt sich aus zwei Größenbereichen zusammen, wobei für jeden dieser Bereiche

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

ein anderes Potenzgesetz vorliegt. Das zweite wesentlich kompliziertere Modell für die Größenverteilung ist Zubko et al. (2004) entnommen. Es beinhaltet eine Größenverteilung, die aus modifizierten Potenzgesetzen und verschiedenen Arten von Staubkörnern zusammengesetzt ist, und die im Folgenden stets mit BGS abgekürzt wird. Insbesondere die Verwendung verschiedener Arten von Staubkörnern wird eine etwas umfassendere Vorbetrachtung erfordern. Die wichtigsten Parameter für die verwendeten Staubverteilungen kann man der Tabelle 3.1 entnehmen.

3.5.1 Die MRN-Verteilung

Diese Verteilung setzt sich aus zwei aneinander anschließenden Größenbereichen zusammen, für die je ein Potenzgesetz gilt. In allgemeiner Form lässt sich die funktionale Abhängigkeit jeder der für die Teilbereiche gültigen Funktionen $f_i(r_d)$, $i = 1, 2$ wie folgt darstellen:

$$\log(f_i(r_d)) = \alpha_i + \beta_i \cdot \log(r_d) \quad (3.33)$$

Die Werte für die Konstanten α_i, β_i sind dabei Pollack et al. (1985) entnommen. Die Dichte der Staubkörner ist dabei gleich der Dichte von Graphit im komplexeren Modell von Zubko et al. (2004).

3.5.2 Die BGS-Verteilung

Wie im Falle der MRN-Verteilung, besteht die Zubko-Verteilung aus mehreren Verteilungen. Diese repräsentieren die Arten von Körnern, die vorzufinden sind (Zubko et al., 2004), und zwar polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAHs) sowie Graphit und Silikate. Das in dieser Arbeit verwendete Modell besitzt jedoch lediglich einen Typus eines Staubkorns mit einer charakteristischen Dichte. Es wird Gegenstand des nächsten Abschnittes sein, wie aus den verschiedenen Teilverteilungen eine resultierende Gesamtverteilung erstellt werden kann. Zunächst gilt es, die allgemeine Struktur der Staubverteilung zu erläutern. Die Gestalt der Größenverteilung ist dadurch begründet, dass sie letztlich eine numerische Anpassung an Beobachtungsdaten ist, die von Zubko et al. (2004) unter Berücksichtigung vieler einschränkender Randbedingungen - chemischer wie physikalischer Natur - gewählt wurde. Dabei haben die Größenverteilungen $f_j(r_d)$ folgende allgemeine Struktur, wobei $j = \{\text{PAH, Graphit, Silikat}\}$:

$$\log(f_j(r_d)) = \alpha_j + \beta_j \cdot \log(r_d) - \sum_k \gamma_{jk} |\log(r_d/\delta_{jk})|^{\zeta_{jk}} \quad (3.34)$$

$$- \sum_k \eta_{jk} |r_d - \theta_{jk}|^{\xi_{jk}} \quad (3.35)$$

Dabei bezeichnen alle mit griechischen Buchstaben versehenen Variablen numerische Parameter, die Zubko et al. (2004) entnommen wurden. Jede Verteilung ist nur über einen bestimmten Größenbereich $r_{min}^{(j)} \leq r_d \leq r_{max}^{(j)}$ gültig, wo sie entsprechend eine eigene charakteristische Massendichte ρ_j besitzt (Zubko et al., 2004). Da man im Gegensatz zur MRN-Verteilung für eine Staubgröße verschiedene funktionale Abhängigkeiten zur Verfügung hat, müssen diese

Staubgrößen nun mittels eines geeigneten Mittelwertes miteinander verknüpft werden.

3.5.3 Die Berechnung der Teilchenzahldichte

In diesem Abschnitt wird es darum gehen, aus den Größenverteilungen der Staubkörner die Teilchenzahldichte $n_d(r, t)$ für die Staubkörner zu ermitteln. Der wesentliche Gedanke dabei ist, für jede Größenklasse dasjenige Staubkorn zu bestimmen, welches repräsentativ für diese Größenklasse ist, was die Bildung eines geeigneten Mittelwertes erforderlich macht. Dazu diskretisiert man die kontinuierliche Staubgröße r_d mithilfe von $N = 100$ Gitterpunkten auf einem logarithmischen Gitter. Die minimale bzw. maximale Staubgröße ist dabei natürlich gleich dem Minimum bzw. Maximum der Staubgrößen aller Verteilungen:

$$\begin{aligned} r_{max} &= \max \{r_{j,max}\} \\ r_{min} &= \min \{r_{j,min}\} \end{aligned} \quad (3.36)$$

Darin bezeichnen $r_{j,max}$ die maximalen bzw. $r_{j,min}$ die minimalen radialen Staubgrößen der jeweiligen Teilverteilung. Die i -te radiale Größe lässt sich dann leicht wie folgt ermitteln:

$$\begin{aligned} r_d(i) &= r_{min} \cdot \chi^{i-1} \\ r_d(N) &= r_{max} = r_d(1) \cdot \chi^{N-1} \\ i &= 1, \dots, N \end{aligned} \quad (3.37)$$

worin χ den Wachstumsfaktor kennzeichnet. Damit lässt sich nun leicht für jeden diskreten Kornradius $r_d(i)$ ein relativer Beitrag der j -ten Staubverteilung, p_{ij} wie folgt definieren:

$$p_{ij} = \int_{r_d(i) \cdot \sqrt{\chi}^{-1}}^{r_d(i) \cdot \sqrt{\chi}} f_j(\hat{r}_d) d\hat{r}_d \quad (3.38)$$

Mithilfe dieses Beitrages lässt sich die mittlere Dichte eines Korns dieser Größenklasse definieren:

$$\rho_i = \frac{\sum_{j=1}^3 p_{ij} \cdot \rho_j}{\sum_{j=1}^3 p_{ij}} \quad (3.39)$$

Mithilfe der so nur einmalig zu berechnenden Größen lässt sich die Teilchenanzahldichte von Staubkörnern der Korngröße $r_d(i)$ ermitteln. Zu diesem Zweck benutzt man das bekannte Massenverhältnis Z_d von Staub zu Gas ($Z_d \lesssim 1/100$) und errechnet die Teilchenzahldichte wie folgt:

$$n_d(r, r_d(i), 0) = \frac{Z_d \cdot \rho_g(r)}{\rho_i V_i} \quad (3.40)$$

Dabei bezeichnet ρ_i die gemäß Gleichung 3.39 berechnete repräsentative Dichte des Staubkorns mit Radius $r_d(i)$ sowie V_i seine Dichte, wobei ein homogenes Korn angenommen wird. Die

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

Gesamtteilchenzahl setzt sich nun aus Teilchen aller Größen wie folgt zusammen:

$$n_d(r, t) = \sum_{i=1}^N n_d(r, r_d(i), t) \quad (3.41)$$

Damit wurden alle Größen berechnet, die für die selbst-konsistente Bewegung der Staubkörner und die Temperaturen im Kern von Bedeutung sind. Da es für die Simulation der Entwicklung der Häufigkeiten der Spezies zu aufwändig wäre, jede Größenklasse zu berücksichtigen, benötigt man noch den Ausdruck für die Berechnung der mittleren Korngröße:

$$\langle r_d \rangle(r, t) = \frac{\sum_{i=1}^N r_d(i) \cdot n_d(r, r_d(i), t)}{n_d(r, t)} \quad (3.42)$$

Für die Behandlung einer singulären Verteilung wie $f(r_d) = \delta(r_d - r_0)$, wie es bei der Verwendung von klassischen Körnern (Zucconi et al., 2001) mit $r_d \equiv 0.1\mu m$ üblich ist, sind die oben beschriebenen Ansätze natürlich numerisch extrem ineffizient. Dieser Fall tritt bei einem Vergleich des für diese Arbeit entworfenen Bewegungsalgorithmus mit dem von Whitworth und Bate (2002) entworfenen ein. Dieser Fall wird mit nur einer Größenklasse, bei welcher $r_d \equiv 0.1\mu m$ gilt, behandelt. Obwohl eine Veränderung der Staubverteilung durch eine einsetzende Koagulation in Kernen auftreten kann (Ormel et al., 2009; Ossenkopf und Henning, 1994), findet sie in dieser Arbeit leider keine Berücksichtigung. Der Grund liegt einerseits in der Komplexität des Koagulationsprozesses als solchem (Blum und Wurm, 2008; Güttler et al., 2010), als auch darin, dass eine Koagulation der Staubkörner ein bedeutend aufwendigeres Modell erfordern würde. Dies liegt daran, dass bei einer Koagulation Staubkörner erzeugt und vernichtet werden können, während bei einer reinen Bewegung keine Staubkörner vernichtet oder erzeugt werden können. Das Modell für die Veränderung der Häufigkeiten chemischer Spezies und das Modell für die Staubbewegung müssten - im Gegensatz zur reinen Bewegung der Staubkörner - also diese Erzeugungs- und Vernichtungsprozesse in einer geeigneten Form beinhalten, worauf in dieser Arbeit verzichtet werden musste. Eine Zusammenfassung der später bei der Staubbewegung verwendeten Staubgrößenverteilungen bzw. ihrer wesentlichsten Parameter ist in Tabelle 3.1 zu finden.

3.6 Das Temperaturmodell

Nachdem in Abschnitt 3.4 der im Kern stattfindende Strahlungstransport erläutert wurde und in Abschnitt 3.5 die in dieser Arbeit verwendeten Staubmodelle, wird es in diesem Abschnitt um die Gas- und Staubtemperaturen des Kerns gehen. Zunächst werden zu diesem Zweck Dichteprofile von Gas und Staub $\rho_g(r)$, $\rho_d(r)$ als gegeben angenommen, da deren Berechnung für die Beschreibung des Temperaturmodells nicht von Bedeutung ist und Gegenstand des Abschnittes 3.7 sein wird. Da die thermischen Gradienten sowohl für das Gas (Crapsi et al., 2007) als auch für den Staub (Stutz et al., 2010) in Beobachtungen gut nachweisbar sind, ist es sinnvoll, ein

Tabelle 3.1: Übersicht über die in dieser Arbeit verwendeten Staubgrößenverteilungen mit einigen relevanten Parametern.

Verteilung/Parameter	Wert des Parameters/Referenz
mod. MRN Größenverteilung	Pollack et al. (1985)
ρ_d	$2 \cdot gcm^{-3}$
$r_{d,min}$	$5.0 \cdot 10^{-3} \mu m$
$r_{d,max}$	$5.0 \mu m$
$\langle r_d \rangle$	$\approx 8.33 \cdot 10^{-3} \mu m$
Z_d	10^{-2}
Zubko-Verteilung(Bare-Gr-S) ^a	Zubko et al. (2004)
ρ_d	$2 \cdot gcm^{-3} - 3 \cdot gcm^{-3}$
$r_{d,min}$	$3.5 \cdot 10^{-4} \mu m$
$r_{d,max}$	$3.7 \cdot 10^{-1} \mu m$
$\langle r_d \rangle$	$\approx 5 \cdot 10^{-4} \mu m$
Z_d	$6.19 \cdot 10^{-3}$

Notes.

^(a) Die Zahl der entsprechenden Parameter ist zu groß, um sie hier wiederzugeben, eine detaillierte Beschreibung ist in Zubko et al. (2004) zu finden.

Modell für ihre radiale Abhängigkeit zu berechnen, da die in einem QSCC ablaufenden chemischen Prozesse natürlich temperaturabhängig sind (Herbst et al., 2005; Herbst und Wakelam, 2007). Die in dieser Arbeit berechneten Gas- und Staubtemperaturen fußen auf den Modellen von Zucconi et al. (2001) und Goldsmith (2001). Diese Modelle basieren auf der Wechselwirkung von Gas und Staub mittels elastischer und inelastischer Stöße sowie der Wechselwirkung der Staubkörner mit dem Strahlungsfeld J_ν^{is} , welches auf den QSCC einwirkt. Mit den noch zu ermittelnden Heiz- und Kühlraten des Staubs wie auch des Gases sowie der Wechselwirkungsrate zwischen ihnen, entsteht ein nichtlineares Gleichungssystem. Das System von nichtlinearen Gleichungen wird mit iterativen Methoden gelöst, um die jeweiligen Temperaturen zu erhalten. Im Folgenden werden zunächst die Wechselwirkungen des Staubs, die in Bezug auf das hier vorgestellte Modell von Bedeutung sind, betrachtet. Anschließend werden analog die Wechselwirkungen des Gases diskutiert. Das vollständige Modell wird sich dann unter Einbeziehung der Wechselwirkung zwischen Staub und Gas ergeben.

3.6.1 Thermisches Modell des Staubs

Das thermische Modell für den Staub ergibt sich aus den Prozessen, denen ein Korn im QSCC ausgesetzt ist. Betrachtet man das Korn zunächst isoliert, dann wird als einzige Energiequelle die Strahlung, welche auf den Kern trifft, von Bedeutung sein. Jedes Korn wird dabei einem Strahlungsfeld ausgesetzt, dessen Intensität von seiner Position im Kern abhängt, wie in Abschnitt 3.4 begründet wurde. Das Korn wird nach der Absorption der Strahlung und dem damit verbundenen Energiezuwachs Strahlung re-emittieren und dadurch Energie verlieren. Seine

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

Tabelle 3.2: Absorptionseffizienz Q_ν eines Staubkorns für einige ausgewählte Frequenzen bzw. Wellenlängen λ .

Wellenlängenbereich	λ_a^a	$Q_\nu(\lambda_a)$
0.1 - 10 μm	1 μm	$3.9 \cdot 10^{-1}$
10 - 400 μm	140 μm	$1.5 \cdot 10^{-3}$
400 μm - 10 mm	1.06 mm	$3.3 \cdot 10^{-5}$

Notes.

^(a) Der Parameter λ_a ist ein Parameter für die funktionale Abhängigkeit der Absorptionseffizienz Q_ν , die in Zucconi et al. (2001) beschrieben ist.

Temperatur wird dann dadurch bestimmt, dass der Zugewinn an Energie durch den Verlust gerade aufgewogen wird. Entscheidend wird hierbei die Effizienz sein, mit der das Korn mit dem Strahlungsfeld wechselwirkt (Evans et al., 2001; Zucconi et al., 2001). Dies lässt sich quantifizieren, indem man folgende Raten einführt:

$$\Pi_d(r_d, n_d) = n_d(r, r_d, t) \cdot A_d \cdot \pi \int_0^\infty Q_\nu J_\nu(r) d\nu \quad (3.43)$$

$$\Lambda_d(r_d, n_d) = n_d(r, r_d, t) \cdot A_d \cdot \pi \int_0^\infty Q_\nu B_\nu(T_d) d\nu \quad (3.44)$$

Dabei bezeichnet Π_d die Rate, mit der ein Korn dem auf es einwirkenden Strahlungsfeld Energie entnimmt, während Λ_d die Rate bezeichnet, mit der ein Korn durch Abstrahlung Energie verliert. A_d bezeichnet die Oberfläche des wechselwirkenden Korns, $n_d(r, r_d, t)$ die Teilchenzahldichte des Korns mit Radius r_d am Ort r im Kern und Q_ν die frequenzabhängige Absorptionseffizienz des Korns, deren funktionale Abhängigkeit Zucconi et al. (2001) entnommen wurde. Schlussendlich ist $B_\nu(T_d)$ die Planck-Funktion für das Korn, welches bei einer Staubtemperatur T_d emittiert. Für einige der in Zucconi et al. (2001) zur Interpolation verwendeten Wellenlängen ist die Absorptionseffizienz in Tabelle 3.2 vermerkt. Ignoriert man den Effekt des wechselwirkenden Gases, ist die Temperatur T_d des Staubkorns aufgrund der Gleichheit beider Raten, d.h. $\Pi_d = \Lambda_d$, durch die folgende Gleichung gegeben:

$$\int_0^\infty Q_\nu J_\nu(r) d\nu = \int_0^\infty Q_\nu B_\nu(T_d) d\nu \quad (3.45)$$

Eine wichtige Schlussfolgerung dieser Gleichung ist zunächst, dass das Ergebnis unabhängig von der Staubgröße ist und somit natürlich auch unabhängig von der Art der Staubgrößenverteilung des Modells. Dieses in Zucconi et al. (2001) verwendete Modell erfordert die Lösung der nichtlinearen Gleichung 3.45. Für eine gegebene Position im Kern, ist die Staubtemperatur durch die Lösung der Gleichung $F(T_d) = 0$ gegeben, wobei $F(T_d)$ wie folgt definiert ist:

$$F(T_d) = \int_0^\infty Q_\nu B_\nu(T_d) d\nu - \int_0^\infty Q_\nu J_\nu(r) d\nu \quad (3.46)$$

Als eindimensionale stetige und monotone Funktion, lässt sich die Nullstelle dieser Funktion leicht mithilfe der Bisektionsmethode, die gemäß Press et al. (2007) implementiert wurde, finden, wenn geeignete untere und obere Grenzen für die Temperatur bekannt sind. Ein typischer Verlauf der Staubtemperatur in einem QSCC ist in Abbildung 3.9 anhand eines Zucconi et al. (2001) entnommenen Beispiels gezeigt, was zu Testzwecken des Modells - welches ursprünglich auf das hier gestellte thermische Gleichgewicht der Staubkörner beschränkt war - benutzt wurde. Es wurden dabei die Singuläre Isotherme Sphäre (SIS) und die Bonnor-Ebert-Sphäre (BES) als radiale Profile verwendet, die in Abschnitt 3.2 als Lösungen der hydrostatischen Gleichungen eingeführt worden waren.

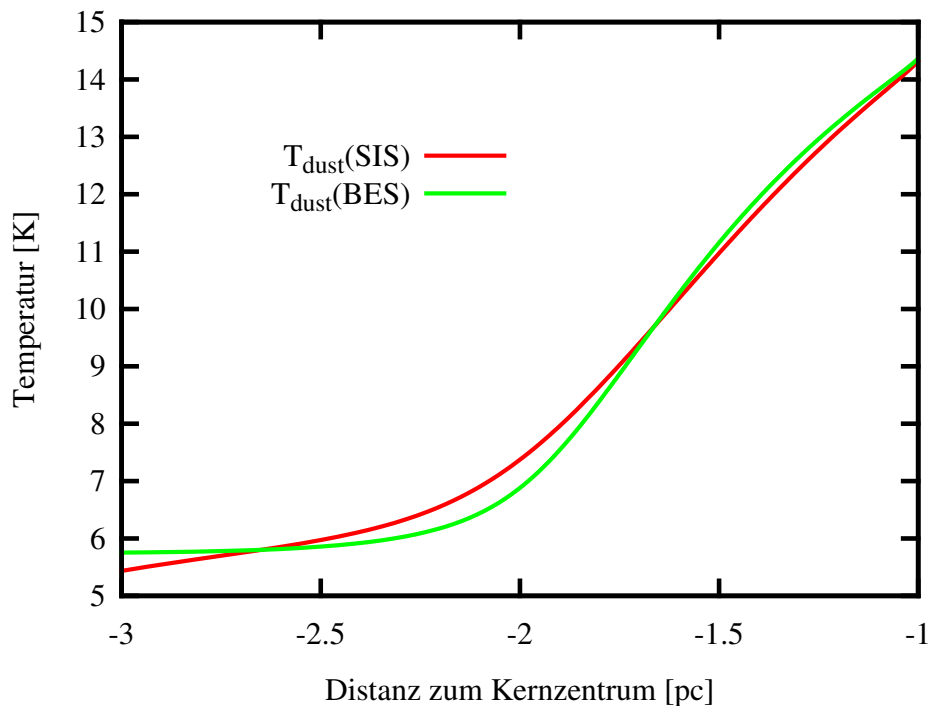


Abbildung 3.9: Qualitativ typischer Temperaturverlauf des Staubs - Die Abbildung zeigt den Temperaturverlauf für zwei verschiedene hydrostatische Konfigurationen einer Isothermen Singulären Sphäre (SIS) und einer Bonnor-Ebert-Sphäre (BES, vgl. Abschnitt 3.2). Die Parameter für diese zu Testzwecken benutzten Konfigurationen wurden Zucconi et al. (2001) entnommen.

3.6.2 Thermisches Modell des Gases

Da die Wechselwirkung des Gases mit dem Strahlungsfeld J_{ν}^{is} gering ist (Helling et al., 2000; Marigo und Aringer, 2009; Semenov et al., 2003; Tsuji und Ohnaka, 1995), wird das Gas nicht durch dieses kontinuierliche Strahlungsfeld geheizt, sondern durch die harte kosmische Strahlung. Von der Wechselwirkung mit dem Staub abgesehen, kann das Gas durch die Emission von Strahlung gekühlt werden. Letzterer Prozess ist ein Prozess, der von der chemischen Zusammensetzung des Gases mitbestimmt wird (Goldsmith, 2001). Für diese Arbeit werden jedoch

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

die von Goldsmith (2001) für eine charakteristische Zusammensetzung erarbeiteten Daten übernommen. In völliger Analogie zum thermischen Modell des Staubs lassen sich folgende Raten definieren (Goldsmith, 2001):

$$\Pi_g(n_g) = \gamma \cdot n_g \quad (3.47)$$

$$\Lambda_g(n_g) = \alpha(n_g) \cdot \left(\frac{T_g}{10}\right)^{\beta(n_g)} \quad (3.48)$$

Dabei bezeichnet Π_g die Rate der durch Absorption von kosmischer Strahlung aufgenommenen Energie des Gases, während Λ_g die durch Emission bestimmte Rate darstellt, mit welcher das Gas Energie verliert. Des Weiteren bezeichnet γ einen von der Dichte des Gases unabhängigen Parameter, während α, β von der Gasdichte abhängige Parameter sind. Diese sind für einige charakteristische Dichten in Goldsmith (2001) tabelliert. Da das Modell auf einen QSCC mit radialem Dichteprofil $n_g(r)$ angewendet wird, müssen die Ausdrücke in den Gleichungen 3.47 und 3.48 für alle Gasdichten bestimmbar sein. Insbesondere werden nicht-tabellierte Dichten vorkommen. Um die Raten für diese Dichten berechnen zu können, wird eine Interpolation mit Splines wie in Abschnitt 3.4.2 vorgenommen. Der Algorithmus für die Interpolation ist dabei abermals Press et al. (2007) entnommen. Im Gegensatz zum thermischen Modell des Staubs ist die Lösung der Temperatur des Gases leicht mithilfe der Auflösung der Gleichung $\Pi_g = \Lambda_g(T_g)$ nach der gesuchten Gastemperatur T_g zu erhalten:

$$T_g = 10 \cdot \exp\left(\frac{\log(\gamma \cdot n_g / \alpha)}{\beta}\right) \quad (3.49)$$

Zu einem vollständigen thermischen Modell fehlt nun noch die Kopplung des Gases mit dem Staub über elastische bzw. inelastische Stöße.

3.6.3 Kopplung von Gas und Staub

Aufgrund von Stößen zwischen Gas und Staub, wird zwischen ihnen Energie übertragen. Dieser Energieübertrag ist näherungsweise proportional zur Stoßfrequenz zwischen dem Korn und Gaspartikeln im Gas und der Differenz der Temperaturen des Gases und des Staubs. Damit lässt sich die folgende Rate Υ definieren (Goldsmith, 2001):

$$\begin{aligned} \Upsilon(r_d) &= \delta n_g n_d \sigma_d v_g \cdot \xi(T_g) \cdot (T_g - T_d) \\ \xi(T_g) &= 1 - \exp\left(-\left(\frac{75K}{T_g}\right)\right) \end{aligned} \quad (3.50)$$

Dabei bezeichnet δ eine Konstante, n_g und n_d bezeichnen jeweils die Gas- und Staubbichten, σ_d bezeichnet den geometrischen Wechselwirkungsquerschnitt eines Staubkorns mit Radius r_d , während v_g die durchschnittliche thermische Geschwindigkeit des Stoßpartners aus dem Gas ist. Zur Berücksichtigung der Tatsache, dass ein Teil der Wechselwirkung durch inelastische Stöße vermittelt wird, wird der Faktor $\xi(T_g)$ von Whitworth et al. (1998) in dieser Arbeit über-

nommen. Bei den für den QSCC relevanten Dichten sind die Körner hocheffizient in der Wechselwirkung mit der Strahlung und dominieren die Energiebilanz. Zudem ist die Abweichung der Temperaturen der Staubkörner mit voneinander verschiedenem Radius aufgrund dieser hohen Effizienz gering, und es genügt, die Bilanzgleichung für die mittlere Korngröße der Staubgrößenverteilung $\langle r_d \rangle = r_{d,m}$ aufzustellen, da eine alternative Mittelwertbildung der Temperaturen über die Verteilung keine wesentlichen Unterschiede erbringt. Das Temperaturmodell, welches die Kopplung von Gas und Staub berücksichtigt, ist somit wie folgt gegeben:

$$\begin{aligned} 0 &= \Pi_d(r_{d,m}, n_d) - \Lambda_d(r_{d,m}, n_d) + \Upsilon(r_{d,m}) \\ 0 &= \Pi_g(n_g) - \Lambda_g(n_g) - \Upsilon(r_{d,m}) \end{aligned} \quad (3.51)$$

Man kann die zeitunabhängige Lösung der Bilanzgleichung verwenden, da die Zeitskala t_{equi} , auf welcher der Energieaustausch zwischen Korn und Gas ins Gleichgewicht kommt, klein ist gegenüber der Zeitskala t_{move} , auf welcher sich die Körner (signifikant) bewegen: $t_{equi} \ll t_{move} \sim O(10^5 a)$, da nur eine Staubbewegung eine Veränderung der Bilanzgleichung, Gleichung 3.51, implizieren würde. Die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems muss iterativ gefunden werden, da eine analytische Umkehrung dieses Typus nicht möglich ist (Goldsmith, 2001). Man definiert zu diesem Zweck eine vektorwertige Funktion $\mathbf{F}(T_g, T_d) = 0$, deren Komponenten durch die Bilanzgleichung 3.51 gegeben sind. Zur Lösung dieses Gleichungssystems wird die Newton-Iteration mit erweiterter Suchstrategie entlang der Abstiegsrichtung verwendet (Press et al., 2007). Die Idee liegt dabei darin, entlang der Abstiegsrichtung nicht nur $\mathbf{F}(T_g, T_d)$ zu minimieren, sondern als Kontrollmechanismus desweiteren die Funktion $f = \langle \mathbf{F}, \mathbf{F} \rangle$ zu minimieren (worin \langle, \rangle das übliche Skalarprodukt bezeichnet) (siehe ggf. Press et al., 2007). Um die Newton-Iteration anzuwenden, benötigt man die Jacobi-Matrix $J_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial T_j}$, um die lokale Abstiegsrichtung zu errechnen. Die Berechnung der entsprechenden partiellen Ableitung bereitet prinzipiell keinerlei Mühe, jedoch führt die partielle Ableitung der Gleichung 3.44 auf eine weitere numerisch zu lösende Gleichung:

$$\frac{\partial \Lambda_d}{\partial T_d}(r_d, n_d) = n_d(r, r_d, t) \cdot A_d \cdot \pi \int_0^\infty Q_\nu \frac{\partial B_\nu}{\partial T_d}(T_d) d\nu \quad (3.52)$$

Bei jedem Aufruf der Funktion $\mathbf{F}(T_g, T_d)$ während der modifizierten Newton-Iteration muss prinzipiell sowohl Λ_d gemäß Gleichung 3.44 als auch $\frac{\partial \Lambda_d}{\partial T_d}$ gemäß Gleichung 3.52 berechnet werden. Es leuchtet leicht ein, dass dies einen hohen numerischen Aufwand bedeutet, der zudem für jede der in einem gut aufgelösten Kern mit $N \approx 300$ vorhandenen Schalen durchgeführt werden muss. Man kann allerdings ohne nennenswerten Verlust der Auflösung des Modells eine Speicherstrategie derart anwenden, dass vor der eigentlichen Iteration für jeden Temperaturwert $T_d(i) = 4 + i \cdot \Delta T_d$, $i < i_m$ die Berechnung von Λ_d und $\frac{\partial \Lambda_d}{\partial T_d}$ durchgeführt wird. Dabei ist für die Zwecke dieses Modells $\Delta T = 10^{-2}$ und $i_m \gtrsim 3 \cdot 10^3$ absolut hinreichend. Statt einer wiederholten numerischen Auswertung der Gleichungen 3.44 und 3.52 genügt es, die entsprechenden vorgespeicherten Werte zu verwenden. Dabei kann bei Temperaturen, die zwischen Gitterpunkten $T_d(i)$ liegen, aufgrund der Vielzahl an Stützstellen linear interpoliert

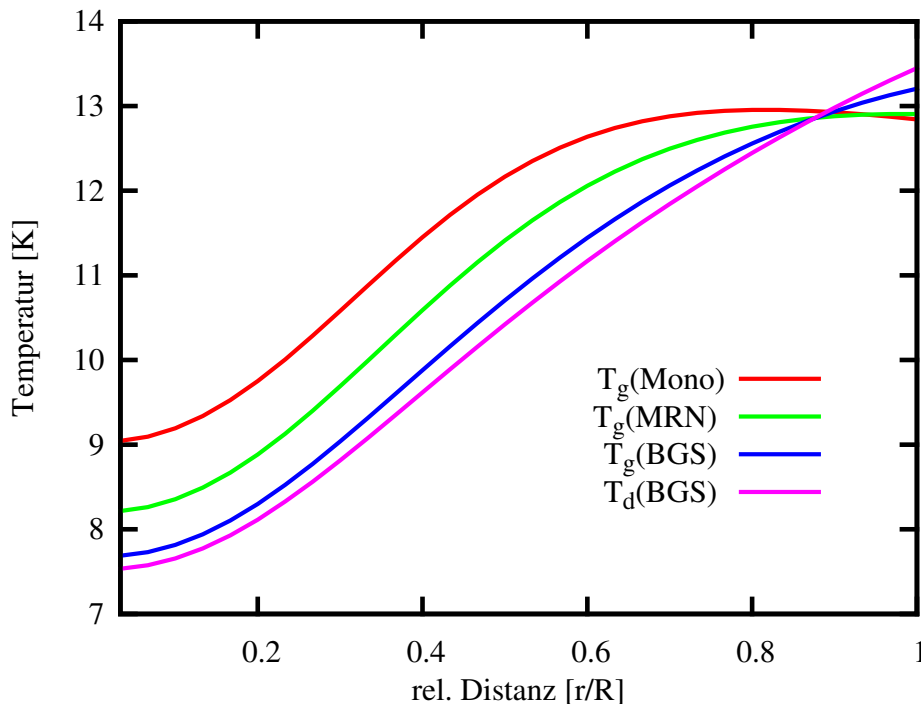


Abbildung 3.10: Vollständige Temperaturprofile unter Berücksichtigung der verschiedenen Staubverteilungen - Die Abbildung zeigt die aus dem Modell resultierenden typischen Temperaturverläufe für die verschiedenen in Abschnitt 3.5 diskutierten Größenverteilungen des Staubs. In der Abbildung wurde Mono abkürzend für Staub, der nur aus $0.1\mu\text{m}$ Körnern besteht, verwendet während MRN und BGS die gleichen Bedeutungen wie in Abschnitt 3.5 besitzen. Die gezeigte Kurve für die Staubtemperatur entspricht dem mithilfe der BGS-Verteilung erhaltenem Resultat und ist repräsentativ für die anderen Größenverteilungen, da die Staubtemperaturen sich nur relativ geringfügig unterscheiden.

werden. Die Lokalisierung des benötigten tabellierten Eintrags geschieht mit einem aus Press et al. (2007) entnommenen Algorithmus, der auf der Anwendung der Bisektion auf die Tabelle basiert. Diese Verfahrensweise beschleunigt den Algorithmus effektiv um einen Faktor ≈ 10 und ist deswegen an dieser Stelle auch diskutiert worden. Ein mithilfe dieses Modells erhaltenes typisches, mit veröffentlichten Resultaten konsistentes (Galli et al., 2002; Goldsmith, 2001; Zucconi et al., 2001) Temperaturprofil ist in Abbildung 3.10 gezeigt. Mithilfe des in diesem Abschnitt vorgestellten Temperaturmodells ist es nun möglich, die Berechnung der Dichteprofle des Gases $\rho_g(r)$ und des Staubs $\rho_d(r)$ durchzuführen.

3.7 Die radialen Profile eines QSCCs

3.7.1 Die vollständigen dynamischen Gleichungen

Nachdem nun mittels eines gegebenen Gasprofils und eines durch das Gas-Staub-Massenverhältnis ebenfalls gegebenen Staubprofils auf die physikalischen Bedingungen in einem QSCC geschlossen werden kann, geht es in diesem Kapitel darum, die Gestalt dieses Gas- bzw. Staubprofils abzuleiten. Dazu werden mit dem allgemeinen Fall beginnend sukzessive die vorgenommenen Approximationen begründet und angewandt. Dabei wird es zunächst um das Gasprofil eines imaginären QSCC ohne vorhandene Einhüllende gehen, bevor im letzten Teil dieses Kapitels auf die Umgebung des QSCC eingegangen wird. Zunächst beginnt man mit den Hydrodynamischen Gleichungen für ein astrophysikalisches, aus den zwei Komponenten Gas und Staub bestehendes, Fluid:

$$\rho_g \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_g}{\partial t} + \rho_g \cdot \mathbf{v}_g \nabla \mathbf{v}_g = -\nabla P_g - \rho_g \nabla \Phi \quad (3.53)$$

$$\frac{d\mathbf{v}_d}{dt} = 2\mathbf{F}_{rad} \cdot d(x) - \beta \cdot \rho_g \cdot \mathbf{v}_d \cdot (|\mathbf{v}_d| + \gamma(T_g)) \quad (3.54)$$

$$d(x) = \int_{-1}^1 e^{-\tau(x,\chi)} \chi d\chi \quad (3.55)$$

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} = -\nabla (\rho_g \cdot \mathbf{v}_g) \quad (3.56)$$

$$\frac{\partial \rho_d}{\partial t} = -\nabla (\rho_d \cdot \mathbf{v}_d) \quad (3.57)$$

$$\nabla^2 \Phi = 4\pi G \rho_g \quad (3.58)$$

$$P_g = F(\rho_g, T_g, \eta_1, \dots, \eta_n) \quad (3.59)$$

$$\rho_d(r, t = 0) = Z_d \cdot \rho_g(r, t = 0) \quad (3.60)$$

Dabei sind $\mathbf{v}_g, \mathbf{v}_d$ die Geschwindigkeiten des Gases bzw. Staubs, ρ_g, ρ_d die jeweiligen Massendichten des Gases bzw. Staubs, P_g der Druck des Gases, $x = r/R$ die relative Distanz zum Zentrum des QSCC, G die Gravitationskonstante, η_1, \dots, η_n empirische Konstanten für die Zustandsgleichung 3.59 sowie Z_d das Massenverhältnis von Staub zu Gas. Die Gleichungen 3.53 und 3.54 stellen die Bewegungsgleichungen für das Gas bzw. den Staub dar, die Gleichungen 3.56 und 3.57 entsprechen der Massenerhaltung beider Komponenten, die Poissongleichung 3.58 beschreibt die Wirkung der Eigengravitation, und Gleichung 3.59 beschreibt die thermodynamischen Eigenschaften des Fluids. Beim Aufstellen dieser Gleichungen sind bereits mehrere Vereinfachungen eingeflossen. Beobachtungen (Leung et al., 1982; Whitworth und Bate, 2002) und Berechnungen (Yate und Millar, 2003) zeigen, dass turbulentes Mischen und Diffusionseffekte bei den in dieser Arbeit untersuchten Kernen eine geringe Rolle spielen und vernachlässigbar sind. Eine entscheidende Vereinfachung erlaubt jedoch der kleine Massenanteil des Staubs ($Z_d \lesssim 1/100$). Dieser geringe Staubanteil ermöglicht es, die Kopplung im Gravitationspotential, Gleichung 3.58, zu vernachlässigen, was unmittelbar zur Folge hat, dass die

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

Staubbewegung nur noch über den Reibungsterm in Gleichung 3.54 an die Gas-Phase gekoppelt ist. Da auch die Staubbewegung ihrerseits zu einer nicht hinreichend starken Anreicherung des Staubs führt, kann man die Berechnung des Gasprofils $\rho_g(r, t)$ in einer quasi-statischen Approximation berechnen. Zunächst wird es um die Berechnung des Gasprofils gehen, während die Bewegung des Staubs in Abschnitt 3.10 betrachtet werden wird.

Die weiteren Vereinfachungen ergeben sich aus der Annahme dieses quasi-statischen Gleichgewichts, welches durch Beobachtungen gestützt wird (vgl. Abschnitt 3.1). Dies bedeutet, dass die Gasgeschwindigkeit klein ist, d.h. $\mathbf{v}_g \approx 0$, und die hydrodynamischen Gleichungen auf ein hydrostatisches Gleichgewicht reduziert werden können:

$$0 = -\nabla P_g - \rho_g \nabla \Phi \quad (3.61)$$

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} = 0 \quad (3.62)$$

$$\nabla^2 \Phi = 4\pi G \rho_g \quad (3.63)$$

$$P_g = F(\rho_g, T_g, \eta_1, \dots, \eta_n) \quad (3.64)$$

Dieses Gleichungssystem lässt sich mithilfe der üblichen Approximation (Aikawa et al., 2005; Bonnor, 1956; Galli et al., 2002) als sphärische symmetrische Konfiguration auf ein gewöhnliches Differentialgleichungssystem reduzieren, wenn die Zustandsgleichung eine geeignete Form besitzt. Zunächst gilt es deshalb, auf die in dieser Arbeit verwendete Zustandsgleichung einzugehen.

3.7.2 Die Zustandsgleichung

Zur Lösung der hydrostatischen Gleichungen 3.61-3.63 benötigt man noch die genaue Form der Zustandsgleichung 3.64, die das Verhalten des Mediums aufgrund der in ihm vorhandenen Wechselwirkungen wiedergibt. Da es sich um ein stark verdünntes Gas handelt, ist es naheliegend, dass die Zustandsgleichung nicht tabelliert gewonnen werden muss, sondern dem Verhalten eines idealen Gases entsprechen sollte (Liboff, 2003). Eine naheliegende Form ist deshalb durch die Zustandsgleichung des idealen Gases gegeben:

$$P_g = \rho_g \cdot \frac{k_b T_g}{\mu} \quad (3.65)$$

Dabei bezeichnet k_b die Boltzmannsche Konstante und $\mu = 2.33 \cdot m_H$ die durchschnittliche Masse eines Teilchens im Gas (Galli et al., 2002; Natta, 2000; Sipilä et al., 2011), wobei m_H die Masse eines Wasserstoff-Atoms bezeichnet. T_g bezeichnet die Temperatur des Gases und M, N die Masse und die Teilchenzahl in einem gegebenen Volumen V . Durch das Einsetzen dieser Zustandsgleichung wird es möglich sein, die hydrostatischen Gleichungen unter der Annahme der sphärischen Symmetrie auf eine Differentialgleichung zweiter Ordnung zurückzuführen und somit zu lösen, was Gegenstand des nächsten Abschnittes sein wird. Es soll nicht unerwähnt

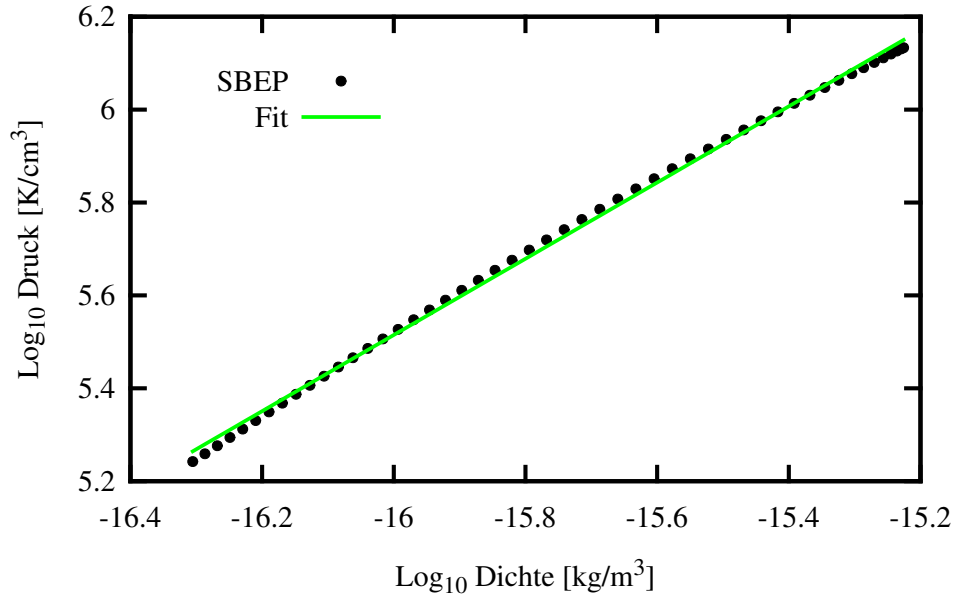


Abbildung 3.11: Berechnung der polytropischen Koeffizienten mithilfe eines gegebenen Gasprofils - Die Abbildung zeigt schematisch die Übereinstimmung zwischen einem gegebenen selbst-konsistenten Gasprofil bzw. dessen Druck und der rein analytisch gegebenen Darstellung durch die polytropische Zustandsgleichung (Gleichung 3.66).

bleiben, dass es numerisch sehr vorteilhaft wäre, wenn man statt der explizit von der Temperatur abhängigen Zustandsgleichung 3.65 eine polytropische Zustandsgleichung benutzen könnte (Liu, 1996; Spaans und Silk, 2000, 2005):

$$P_g = K \cdot \rho_g^\gamma \quad (3.66)$$

Diese würde die Lösung der Hydrostatischen Gleichungen vereinfachen, da kein explizites Temperaturprofil benötigt wird. Natürlich liegt die Schwierigkeit darin, die Koeffizienten K und γ der polytropischen Zustandsgleichung 3.66 zu ermitteln. Wie Abbildung 3.11 zeigt, wäre es mit einem gegebenen Gasprofil ρ_g und gegebenem Druck P_g unter Verwendung der Zustandsgleichung 3.66 und der daraus resultierenden Beziehung $\log(P_g) = F(\rho_g, K, \gamma)$ leicht, die entsprechenden Koeffizienten zu ermitteln. Diese hängen jedoch relativ stark von dem umgebenen Strahlungsfeld und damit insbesondere von der noch zu diskutierenden Einhüllenden ab. Zudem spielt auch das verwendete Staubmodell eine Rolle (siehe ggf. Abschnitt 3.6), und schließlich wären die Koeffizienten aufgrund der Bewegung des Staubs (vgl. Abschnitt 3.10) auch zeitabhängig. In dieser Arbeit wird deshalb durchgängig von der Zustandsgleichung des idealen Gases 3.65 Gebrauch gemacht.

3.7.3 Die sphärisch-symmetrische Lösung

Mithilfe der einfachen Gestalt der Zustandsgleichung ist es nun möglich, die Gleichungen für das hydrostatische Gleichgewicht (3.61-3.64) zu kombinieren und somit zu einer Bewegungsgleichung für die Gasdichte $\rho_g(r)$ zu gelangen. Dazu wird auf die in Abschnitt 3.1 gemachten Überlegungen zurückgegriffen und eine Konfiguration angenommen, die sich näherungsweise sphärisch-symmetrisch beschreiben lässt (oder sich dadurch gut approximieren lässt, wie bei der Dunkelwolke Barnard 68 (Burkert und Alves, 2009)). Durch Einsetzen der entsprechenden Differentialoperatoren in den Gleichungen 3.61-3.63 und der Gestalt der Zustandsgleichung (Gleichung 3.65) aus dem vorhergehenden Abschnitt 3.7.2 ergibt sich das folgende System von Gleichungen:

$$\frac{dP_g(r)}{dr} = -\rho_g(r) \frac{d\Phi(r)}{dr} \quad (3.67)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Phi(r)}{dr} \right) = 4\pi G \rho_g(r) \quad (3.68)$$

$$P_g(r) = \rho_g(r) \cdot \frac{k_b \cdot T_g(r)}{\mu} \quad (3.69)$$

Dabei konnten aufgrund der radialen Symmetrie die partiellen Ableitungen der entsprechenden Operatoren durch die totale Ableitung ersetzt werden. Das Einsetzen der Zustandsgleichung, Gleichung 3.69, in Gleichung 3.67 und das darauf folgende Einsetzen der resultierenden Gleichung $\frac{d\Phi}{dr}(\rho_g)$ in Gleichung 3.68 ergibt die folgende nichtlineare Differentialgleichung zweiter Ordnung für das gesuchte radiale Profil $\rho_g(r)$:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(\frac{r^2}{\rho_g(r)} \frac{d}{dr} \left(\rho_g(r) \cdot \frac{k_b \cdot T_g(r)}{\mu} \right) \right) = -4\pi G \rho_g(r) \quad (3.70)$$

Gleichung 3.70 stellt die vollständige Lösung des Problems dar und lässt sich als gewöhnliches Differentialgleichungssystem lösen. Bevor man auf die Verfahren zur Lösung des Systems eingeht, ist es sehr nützlich, die Gleichung durch Einführung geeigneter Variablen dimensionsfrei zu gestalten. Dazu werden die folgenden neuen Variablen ψ , ξ und τ definiert (Sipilä et al., 2011, 2010):

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{T(r)}{T_c} \\ \rho &= \frac{\rho_c}{\tau} \cdot e^{-\psi} \\ r &= \sqrt{\frac{k_b \cdot T_c}{4\pi \mu G \rho_c}} \cdot \xi \end{aligned} \quad (3.71)$$

Dabei ist ρ_c die Dichte im Zentrum des Kerns und T_c die entsprechende Temperatur im Kernzentrum. Durch Einsetzen dieser Ausdrücke in die Gleichung 3.70 erhält man die folgende dimensionslose Gleichung, welche eine Verallgemeinerung der Lane-Emden Gleichung (Emden,

1907) darstellt (Sipilä et al., 2011, 2010):

$$\frac{1}{\xi^2} \frac{d}{d\xi} \left(\xi^2 \tau \frac{d\psi}{d\xi} \right) = \frac{e^{-\psi}}{\tau} \quad (3.72)$$

Die Gleichung 3.72 hat gegenüber der Gleichung 3.70 den großen Vorteil, dass die radiale Dimension geeignet heraustransformiert worden ist und somit die Gleichung einer numerischen Lösung besser zugänglich ist. Die Lösung der Gleichung erfordert nun ein Temperaturprofil $T_g(r)$ bzw. $\tau(\xi)$. Dieses ergibt sich mithilfe des in Abschnitt 3.6 eingeführten Modells und kann somit als gegeben betrachtet werden. Die numerische Lösung der Gleichung 3.72 erhält man, indem man die Differentialgleichung zweiter Ordnung in ein System von zwei Differentialgleichungen erster Ordnung überführt (Hairer et al., 2011). Dieses System zweier Differentialgleichungen lässt sich dann als Anfangswertproblem ganz analog zu den Gleichungen für die Häufigkeiten der chemischen Spezies (vgl. Abschnitt 4.1) integrieren, wobei die folgenden Anfangswerte für $\xi = 0$ vorliegen (Sipilä et al., 2011, 2010):

$$\begin{aligned} \psi &= 0 \\ \frac{d\psi}{d\xi} &= 0 \\ \tau &= 1 \\ \frac{d\tau}{d\xi} &= 0 \end{aligned} \quad (3.73)$$

Dabei ergeben sich die Anfangsbedingungen für ψ und τ unmittelbar mithilfe ihrer Definition in Gleichung 3.71. Währenddessen ermöglichen die verbleibenden zwei Anfangsbedingungen eine reguläre Lösung für das Dichteprofil. Bei der praktischen Anwendung benötigt man die Ableitung $\frac{d\tau}{d\xi}$ des radialen Temperaturprofils $\tau(\xi)$, das man mithilfe einer Interpolation aus den auf den radialen Schalen ermittelten Werten $T(r_i)$ konstruieren muss. Dabei zeigt sich, dass die Stabilität der Integration der Gleichung 3.72 eine hohe Genauigkeit der Interpolation des Temperaturprofils erfordert. Um den dadurch bedeutend erhöhten numerischen Aufwand zu vermeiden, lässt sich die Integration der Gleichung 3.72 auch anders durchführen. Dazu integriert man auf Teilintervallen $[\xi_i, \xi_{i+1}]$, wobei auf jedem Teilstück eine jeweils konstante interpolierte Temperatur angenommen werden kann. Um eine Konvergenz zu gewährleisten, ist die Zahl der Teilintervalle variabel und wird adaptiv durch das Temperaturprofil bestimmt. Der Vorteil dieses Verfahrens liegt darin, dass nur eine Interpolation des Temperaturprofils $\tau(\xi)$ benötigt wird und in der wesentlich größeren numerischen Stabilität des Verfahrens. Es wurde deshalb in dieser Arbeit bei der Berechnung des radialen Profils $\rho_g(r)$ verwendet.

3.7.4 Die einbettende Umgebung

Wie in der Einleitung (Kapitel 1) erläutert wurde, ist der QSCC eingebettet, und besitzt als solcher natürlich einen Übergangsbereich zu weiteren Kernen (Bergin und Tafalla, 2007; van

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

Dishoeck und Blake, 1998; Zucconi et al., 2001). Analog dem QSCC selber handelt es sich natürlich genau betrachtet um komplexe Strukturen, die je nach Region und Kernen verschiedene Formen annehmen (Bergin und Tafalla, 2007; van Dishoeck und Blake, 1998). Andererseits ist ein QSCC nicht unbedingt derart isoliert, dass ein radial asymmetrisches Strahlungsfeld angenommen werden muss (Evans et al., 2001; Zucconi et al., 2001), was wiederum impliziert, dass auch das umgebende Medium (welches für den Strahlungstransport verantwortlich ist) radial nicht sehr asymmetrisch gestaltet ist. Es ist deshalb möglich, die Umgebung des Kernels durch eine radialsymmetrische Schale um den QSCC herum zu approximieren. Natürlich variieren die Kerne untereinander in ihrer Einbettung (Bergin und Tafalla, 2007; Markwick et al., 2000; Pagani et al., 2004; Peng et al., 1998; Smith et al., 2004), weshalb keine repräsentative Schale gewählt werden kann. Stattdessen variiert man die Dicke der Schale solange, bis der Teil des radialen optischen Pfades (entsprechend $\theta = 0$, vgl. Abbildung 3.3), der *nur* in der Einhüllenden, d.h. nur in der radialsymmetrischen Schale verläuft, einen gewählten Wert annimmt (Zucconi et al., 2001). Das Maß an Einbettung lässt sich anhand der optischen Extinktion definieren, die sich wie folgt ermitteln lässt (Unsöld und Baschek, 2001):

$$A_V = -2.5 \cdot \log_{10} \left(\frac{I_V(s)}{I_V(s_0)} \right) \quad (3.74)$$

Dabei sind die geminderte Intensität $I_V(s)$ nach Durchlauf einer Strecke Δs im Medium und die einfallende Intensität $I_V(s_0)$ wie in der formalen Lösung der quellenfreien Strahlungstransportgleichung 3.7 definiert. Mithilfe der Definition der optischen Tiefe, Gleichung 3.7, ergibt sich der folgende Zusammenhang zwischen A_V und τ_V :

$$A_V = 1.086 \cdot \tau_V \quad (3.75)$$

Der Wert A_V ist nun je nach gewünschter Einbettung der Wolke wählbar. Typische Werte liegen zwischen schwach abgeschirmten Wolken mit $A_V \approx 1$ und tief eingebetteten Wolken mit $A_V \gtrsim 10$ (Bergin und Tafalla, 2007; Pagani et al., 2004; Peng et al., 1998). Die QSCC, die in dieser Arbeit zur Berechnung der Entwicklung der chemischen Häufigkeiten verwendet werden, sind eher stärker abgeschirmt, was einer Entstehung des solaren Nebels unter der Annahme einer störungsärmeren Situation entspricht. Diese liegt bspw. bei Kernen im Sternbild Ophiuchus vor (Montmerle et al., 2006). Dieses enthält Sterne und Sternentstehungsgebiete geringer Masse, die typischerweise gut eingebettet vorliegen.

Unter Berücksichtigung der oben beschriebenen Punkte, gibt es nun zwei grundlegende Möglichkeiten, die Dichte dieser Einhüllenden zu berechnen. Der Ansatz von Zucconi et al. (2001) besteht darin, eine typische repräsentative Dichte der Einhüllenden zu wählen, welche daran orientiert ist, einem typischen Druck in Riesenmolekülwolken zu entsprechen. Dieser Ansatz besitzt den Nachteil, dass die Dichte der Einhüllenden sich beträchtlich vom hydrostatischen Kern unterscheiden kann, was physikalisch natürlich nicht einleuchtend ist. In dieser Arbeit wird deshalb die Dichte der Einhüllenden so gewählt, dass sie der Dichte des hydrostatischen

Kerns am Rand entspricht. Im Gegensatz zu (Zucconi et al., 2001) werden die so erzeugten QSCC konsistent sein, sowohl was den (approximativ) bekannten Randdruck als auch das thermische Profil betrifft. Bevor erläutert wird, mit welcher Methodik die Kerne angepasst wurden, um einen geeigneten Randdruck zu besitzen, wird im Folgenden zunächst auf die erforderlichen Berechnungen für ein Profil $\rho_g(r)$ eingegangen, welches selbstkonsistent im Hinblick auf sein thermisches Profil $T_g(r)$ ist.

3.8 Das selbst-konsistente Profil

Ein gegebenes Gasprofil $\rho_g(r)$ impliziert nach Abschnitt 3.6 ein radiales Temperaturprofil $T_g(r)$. Umgekehrt ergibt die Lösung der hydrostatischen Gleichung mit einem gegebenen Temperaturprofil $T_g(r)$ ein Gasprofil $\rho_g(r)$, wie in Abschnitt 3.7 erläutert wurde. Es ist naheliegend, dass deswegen im allgemeinen eines der gegebenen Profile nicht zum jeweils anderen passen wird, d.h. dass nur eine der zwei notwendigen Implikationen $T_g(r) \Rightarrow \rho_g(r)$ und $\rho_g(r) \Rightarrow T_g(r)$ erfüllt sein wird. Um ein Profil ermitteln zu können, welches selbst-konsistent ist, d.h. beide Implikationen im Rahmen einer gewünschten numerischen Genauigkeit erfüllt, ist deshalb in jedem Falle eine Iteration notwendig. Von den verschiedenen zur Verfügung stehenden Verfahren ist eine Fixpunkt-Iteration optimal, da sie keine Kenntnisse über differentielle Änderungen eines der beiden Profile benötigt. In der Tat ist es möglich, mithilfe einer Fixpunkt-Iteration

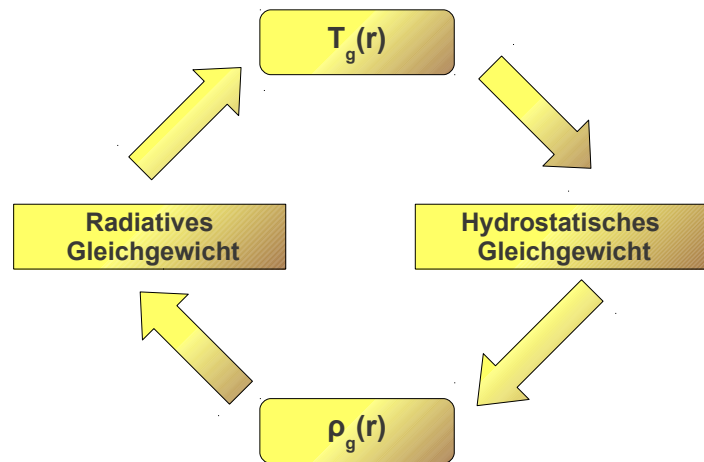


Abbildung 3.12: Schematische Darstellung der Fixpunkt-Iteration - Die Abbildung skizziert das Vorgehen der in dieser Arbeit verwendeten Fixpunkt-Iteration. Für ein gegebenes Gasprofil $\rho_g(r)$ wird dabei das Temperaturprofil $T_g(r)$ berechnet, welches wiederum ein Gasprofil $\rho_g(r)$ impliziert. Der Prozess wird solange fortgesetzt, bis die relative Änderung des Gasprofils $\rho_g(r)$ an allen radialen Punkten r einen gegebenen Schwellwert nicht mehr überschreitet.

(schematisch in Abb. 3.12 skizziert) das selbst-konsistente Profil zu ermitteln. Eine heuristische

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

Argumentation dafür, dass die Fixpunkt-Iteration konvergiert, ließe sich folgendermaßen geben: Dazu denkt man sich ein gegebenes Gasprofil $\rho_g(r)$, wobei man als einzige grundlegende Bedingung fordert, dass man die zentrale Kerndichte festhält, d.h. $\rho_c = \rho_g(r = 0) = \text{const.}$. Ein schwach abfallendes Gasprofil (d.h. hohe Kerntemperaturen) besitzt in den äußeren radialen Zonen eine größere Dichte, was durch die gegebene Abschirmung niedrigere Kerntemperaturen zur Folge hat. Benutzt man nun andererseits den durch die geringe Temperatur induzierten stärkeren Abfall der Dichte, muss die Abschwächung der Strahlung ebenfalls schwächer werden, was steigende Temperaturen impliziert. Steigende Temperaturen implizieren einen schwächeren Abfall der Dichte und somit wieder eine stärkere Abschwächung der Strahlung, was wiederum die Temperatur vermindert. Man sieht somit, dass beide Variablen sich genau wechselseitig beeinflussen, und somit eine Fixpunkt-Iteration zum Ziel führt. In Abbildung 3.13 ist dieser Prozess anhand verschiedener Iterationsstufen der Fixpunkt-Iteration veranschaulicht. Dabei wird der Anschaulichkeit halber und zur Demonstration der schnellen Konvergenz eine besonders unzureichende Anfangsbedingung für die Fixpunkt-Iteration gewählt.

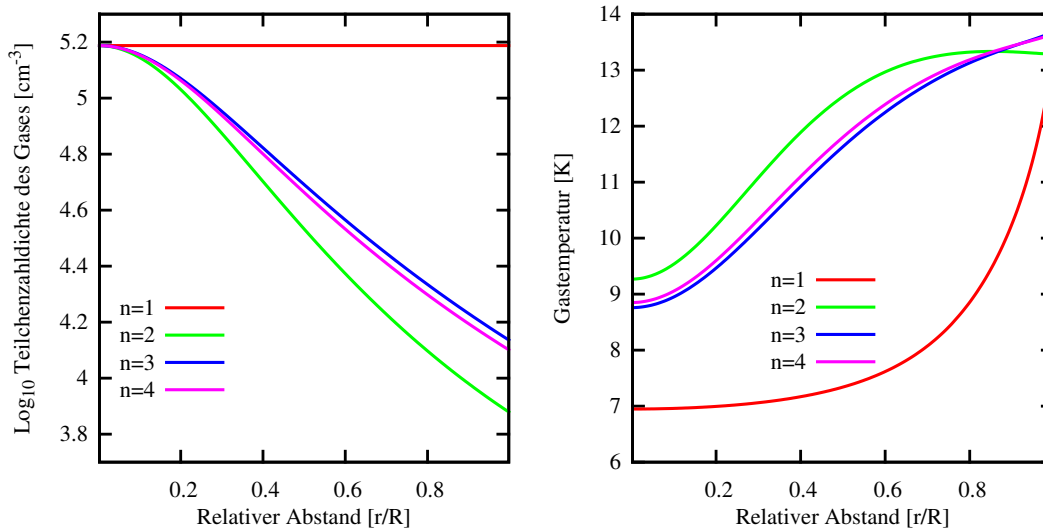


Abbildung 3.13: Verschiedene Iterationsstufen der selbst-konsistenten Iteration - Die Abbildung zeigt für die jeweilige Iterationsstufe das vorliegende Gas- und Temperaturprofil. Zur Veranschaulichung wurde eine sehr ungenügende Anfangsbedingung gewählt. Die Konvergenz ist schnell, typischerweise werden weniger als 6 Iteration für die finale Konfiguration benötigt. Als Konvergenzkriterium wird die relative Änderung der Dichte für jeden Gitterpunkt berechnet.

3.9 Das selbst-konsistente Profil mit Randdruck

Wie im vorhergehenden Abschnitt gezeigt werden konnte, lässt sich mithilfe eines gegebenen Strahlungsfeldes und eines gegebenen Gasprofils als entsprechende Anfangsbedingung durch eine Fixpunktiteration das dazu passende selbst-konsistente Profil errechnen. Um in einer gegebenen Gaskonfiguration existieren zu können, muss der innere Druck der Wolke dem äußeren,

auf die Wolke vom umgebenden Medium ausgeübten Druck entsprechen, was nicht notwendigerweise der Fall ist. Da aber Kerne bei gegebenem Radius R und gegebener zentraler Dichte ρ_c sowie gegebenem äußerem Strahlungsfeld (Zucconi et al., 2001) eine feste, nämlich die selbst-konsistente Gestalt besitzen, kann man die Wolkenkonfiguration durch Variation der zwei Parameter R, ρ_c dahingehend abändern, dass der äußere Druck konsistent wiedergegeben werden kann. Es wird nicht überraschen, dass dies ein stark nichtlinearer Prozess ist und nur mithilfe der Newton-Iteration, die bereits in Abschnitt 3.6 verwendet wurde, gelöst werden kann. Aufgrund der erwähnten Unkenntnis über die Umgebung des solaren Nebels (Montmerle et al., 2006), kann man auch über das Strahlungsfeld nur begrenzt Aussagen treffen. Um diesem Umstand Rechnung tragen zu können, skaliert man die Intensität des Strahlungsfeldes mit einem Faktor G_0 , wie in der Literatur vorgeschlagen (Galli et al., 2002). Dabei fordert man, dass die Intensität des Strahlungsfeldes nicht zu groß wird, d.h. $1 < G_0 \lesssim 3$. Wie Simulationen zeigen, ist die Berechnung eingebetteter Kerne (vgl. Abschnitt 3.7.4) mit dem Modell im Rahmen der vorgenommenen Vereinfachungen möglich. Um nun den Druck abschätzen zu können, benutzt man für $G_0 = 1$ den Wert $(P_{ext}/k_b) \approx 8 \cdot 10^4 K \cdot cm^{-3}$ von Zucconi et al. (2001) und für $G_0 = 100$ den Wert $(P_{ext}/k_b) \approx 10^6 K \cdot cm^{-3}$ von Galli et al. (2002). Dabei bezeichnet k_b wie zuvor die Boltzmann-Konstante. Die Interpolation für beliebige Werte G_0 von $1 < G_0 < 100$ geschieht mithilfe des folgenden empirischen Ausdrucks ($[K \cdot cm^{-3}]$):

$$(p_{ext}(G_0)/k_b) = e^{\alpha \cdot G_0 + \beta} \quad (3.76)$$

Dabei sind α und β reelle Konstanten, die sich mithilfe der zwei zuvor gegebenen Werte $(P_{ext}(1)/k_b)$ bzw. $(P_{ext}(100)/k_b)$ leicht errechnen lassen. Die grundlegende Idee liegt dabei weniger darin, einen möglichst exakten Ausdruck für den externen Druck zu erhalten, sondern darin, eine ungefähre Abschätzung zu ermöglichen. Dadurch kann man die Effekte des Strahlungsfeldes auf die im Kern ablaufenden Änderungen der Häufigkeiten der chemischen Spezies studieren. Mithilfe des so gegebenen externen Drucks kann man nun die folgende nichtlineare, vektorwertige Funktion \mathbf{F} definieren, die eine näherungsweise Lösung des Problems ermöglicht:

$$\begin{aligned} F_1(R, \rho_c) &= p_{ext} - \rho_g(R) \cdot \frac{k_b T_g(R)}{\mu} \\ F_2(R, \rho_c) &= M_0 - 4\pi \int_0^R \rho_g(r) r^2 dr \end{aligned} \quad (3.77)$$

Die numerische Behandlung dieser Gleichung wird dadurch erschwert, dass die Einträge der Jacobi-Matrix $J_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial x_j}$ (wobei $\mathbf{x} = (R, \rho_c)^T$ gesetzt wurde) numerisch berechnet werden müssen und nicht in analytischer Form vorliegen. Die Approximation der Jacobi-Matrix der in Gleichung 3.77 gegebenen Funktion wird mithilfe der in Press et al. (2007) benutzten Methodik durchgeführt, da diese für das gegebene Problem eine hinreichende Genauigkeit besitzt.

3.10 Bewegung des Staubs

3.10.1 Die allgemeine Bewegungsgleichung

Aufgrund des großen Einflusses des im QSCC befindlichen Staubs auf die vorliegenden physikalischen Bedingungen, ist es nicht verwunderlich, dass seine Bewegung für die physikalischen Bedingungen, die im QSCC vorliegen, ebenfalls bedeutsam ist. Ursächlich für die Bewegung ist die örtlich und zeitlich variable Strahlungsintensität im Wolkenkern (Whitworth und Bate, 2002). Der auf diese Art bewegte Staub ruft eine Veränderung der Temperaturprofile von Gas und Staub hervor. Dies bedingt einen sehr kleinen aber nicht verschwindenden Transport des Gases innerhalb des Kerns. Für eine exakte Berücksichtigung dieses Terms, der auch einen Staubtransport bedingt, wären die vollständigen hydrodynamischen Gleichungen zu lösen. Aufgrund der geringen Gasgeschwindigkeit wird die Gasbewegung in dieser Arbeit in einer quasi-statischen Approximation berechnet, was Gegenstand des Kapitels 3.11 ist. Die weiteren Überlegungen diesen Abschnittes geschehen unter Vernachlässigung des Staubtransports durch diesen Effekt und betrachten nur die Staubbewegung, die durch den Strahlungsdruck hervorgerufen wird.

Die variable Strahlungsintensität hat zur Folge, dass der Impulsübertrag der Strahlung auf das Korn nicht von allen Richtungen identisch ist und somit die auf das Korn wirkende Gesamtkraft von Null verschieden ist. Wie bereits Whitworth und Bate (2002) und Leung et al. (1982) schlussfolgern, kann die Turbulenz in Kernen mit geringer Masse vernachlässigt werden, da sie hinreichend kleiner ist als die lokale Schallgeschwindigkeit des Gases. Dies wird durch Berechnungen von Yate und Millar (2003) ebenfalls gestützt. Aufgrund der sehr großen Zahl der Staubkörner können wir die Methoden der Fluid-Dynamik zur Beschreibung heranziehen. Mit der fundamentalen Bewegungsgleichung für den Staub (Whitworth und Bate, 2002), der Kontinuitätsgleichung (Landau und Lifshitz, 1987) sowie den erforderlichen Randbedingungen gelangen wir zu den im vorhergehenden beschriebenen System von Differentialgleichungen 3.53-3.60. Dieses in dieser Form noch allgemeine Problem lässt sich aber noch dadurch vereinfachen, dass man die in Abschnitt 3.3 begründete näherungsweise vorliegende radiale Symmetrie ausnutzt. Diese Symmetrie hat zur Folge, dass die auf ein Korn wirkende Kraft \mathbf{F}_{rad} nur in Richtung Kernzentrum zeigen kann und damit natürlich ein radiales Vektorfeld ist, d.h. $\mathbf{F}_{rad} = F_{r,rad} \cdot \mathbf{e}_r$ ebenso wie das Geschwindigkeitsfeld $\mathbf{v}_d = v_{r,d} \cdot \mathbf{e}_r$. Durch das Umschreiben der Gleichungen 3.53-3.60 mittels der Anwendung von Kugelkoordinaten entstehen folgende Gleichungen:

$$\frac{\partial \rho_d}{\partial t} = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} (v_{r,d} \cdot \rho_d) \right) \quad (3.78)$$

$$\frac{dv_{r,d}}{dt} = 2F_{r,rad} \cdot d(x) - \beta \cdot \rho_g \cdot v_{r,d} \cdot (|v_{r,d}| + \gamma(T_g)) \quad (3.79)$$

$$d(x) = \int_{-1}^1 e^{-\tau(x,\chi)} \chi d\chi \quad (3.80)$$

$$\rho_d(r, t = 0) = Z_d \cdot \rho_g(r) \quad (3.81)$$

$$(v_{r,d} \cdot \rho_d) \big|_{r=r_m} = \eta \quad (3.82)$$

Das Integrodifferentialgleichungssystem 3.78-3.82 stellt die endgültige Bewegungsgleichung für die Staubbichte $\rho_d(r, t)$ am Ort r im QSCC dar. Die Gleichung 3.82 beschreibt dabei den Fluss des Staubs am Rande des Integrationsgebietes der in dieser Arbeit den Wert 0 besitzt, d.h. es gibt kein externes Staubreservoir. Implizit hat man dabei eine charakteristische Größe für alle Staubkörner angenommen. Wenn man nun berücksichtigt, dass die Staubkörner einer Größenverteilung unterliegen (Dirks et al., 2008; Draine, 2003; Mathis et al., 1977; Zubko et al., 2004), stellt der Koeffizient β eine Funktion eben dieser Größe dar (Whitworth und Bate, 2002). Dann hat man für jede Größenklasse an Staubkörnern, die man zulässt, ein Gleichungssystem der Form 3.78-3.82 numerisch zu lösen. Ein naheliegender Ansatz wäre die Diskretisierung des Systems mithilfe finiter Differenzen, die sich in entsprechend abgewandelter Form auch in nicht-kartesischen Koordinatensystemen anwenden lassen (Evans et al., 2000). Da die Bewegung des Staubs mit einigen Unsicherheiten assoziiert ist (Whitworth und Bate, 2002), benötigt man kein Verfahren mit einer sehr hohen Genauigkeit. In dieser Arbeit wird deshalb ein explizites Verfahren verwendet, welches auf einem Finite-Volumen Ansatz basiert. Die Ableitung wird in den folgenden Abschnitten gegeben. Zunächst muss ein effizientes Verfahren für die Lösung der Bewegungsgleichung eines Staubkorns gefunden werden, denn explizite Verfahren benötigen kleinere Zeitschritte Δt (Evans et al., 2000).

3.10.2 Die Lösung der Bewegungsgleichung für ein Staubkorn

Es ist naheliegend, dass der Strahlungsdruck aufgrund der unterschiedlichen Masse der beteiligten Staubkörner unterschiedliche Beschleunigungen hervorruft. In völliger Analogie werden die Staubkörner unterschiedlicher Größe im Medium auch unterschiedlich stark gebremst, wobei kleinere Körner eine größere Abbremsung erfahren. Die Abhängigkeit der Koeffizienten $F_{r,rad}$ sowie β im definierenden Gleichungssystem 3.78-3.81 lässt sich dabei wie folgt angeben (Whitworth und Bate, 2002):

$$F_{r,rad} = \eta_0 \cdot \frac{P_{rad}}{r_d} \quad (3.83)$$

$$\beta = \frac{\eta_1}{r_d}$$

Dabei sind η_0 sowie η_1 in Whitworth und Bate (2002) näher definierte reelle Konstanten, P_{rad} die im Strahlungsfeld *außerhalb* des Kerns enthaltene Leistung und r_d der Radius des Staubkorns, welches aufgrund des wirkenden Strahlungsdrucks bewegt wird. Da die Staubkörner einer kontinuierlichen Verteilung unterliegen, erhält man somit so viele Integrodifferentialgleichungssysteme wie es Größenklassen von Staubkörnern gibt. Die Diskretisierung der Staubgrößen geschieht dabei auf einem logarithmischen Gitter:

$$r_d^{(i)} = r_d^{(0)} \cdot \eta_2^i \quad i = 1, \dots, N_d \quad (3.84)$$

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

Dabei bezeichnet η_2 den entsprechenden Faktor, mit welchem die Staubgröße je Zelle wächst, und N_d die Gesamtzahl der verwendeten Zellen. Für dieses Modell wurde der Wert von $N_d = 100$ festgelegt, da man damit eine hinreichend gute Auflösung für jede der verwendeten Staubverteilungen besitzt. Um nun das System 3.78-3.82 zu diskretisieren, stellt man sich vor, dass man sich in einer radialen Schale des Kerns befindet (vgl. Abbildung 3.2). Staubkörner, die sich in unterschiedlicher radialer Entfernung vom Zentrum befinden, werden sich gemäß dem System der Gleichungen 3.78-3.82 unterschiedlich schnell bewegen. Die entscheidende Vereinfachung besteht nun darin, für eine gegebene radiale Schale *konstante* physikalische Bedingungen anzunehmen. Jedes in der Schale befindliche Korn bewegt sich in dieser Approximation gleich schnell, so dass man lediglich die Bewegungsgleichung lösen muss, um aus der Lösung $v_{r,d}(t)$ ableiten zu können, welcher Anteil der Staubkörner der radialen Schale sich aus dieser radialen Schale heraus bewegt hat. Würde dabei für jede radiale Schale und jede Staubgröße eine numerische Lösung der Bewegungsgleichung benötigt werden, wäre der Algorithmus zu ineffizient. Im Rahmen der Approximation hat man es jedoch bei der Bewegungsgleichung für eine gegebene radiale Schale und eine gegebene Staubgröße mit einer gewöhnlichen Differentialgleichung mit *konstanten* Koeffizienten zu tun. Dies ist eine separable Differentialgleichung, deren Lösung sich leicht ermitteln lässt. Zur Vereinfachung der Notation wird im Folgenden $v_{r,d}(r, r_d, t) \equiv v_d$ gesetzt, da die Verallgemeinerung der Lösung für beliebige radiale Schalen und beliebige Staubgrößen keinerlei Probleme bereitet. Des Weiteren kann man das lokale Koordinatensystem so wählen, dass man radial in Richtung Kernzentrum blickt. Die so entstehende Differentialgleichung lautet dabei wie folgt:

$$\frac{dv}{dt} = \alpha - \beta_c \cdot v_d (v_d + \gamma_c) \quad (3.85)$$

Dabei wurden die folgenden Abkürzungen vorgenommen:

$$\begin{aligned} \alpha &= F_{r,rad} \cdot d(x)|_{r=r_i} \\ \beta_c &= \beta \cdot \rho_g|_{r=r_i} \\ \gamma_c &= \gamma(T_g)|_{r=r_i} \end{aligned} \quad (3.86)$$

Da diese Gleichung eine physikalisch motivierte Bewegungsgleichung darstellt, gilt natürlich $\alpha \geq 0$ und $\beta_c > 0$ sowie $\gamma_c > 0$. Das hat zur Folge, dass die Differentialgleichung mithilfe ihrer zwei Fixpunkte wie folgt umschrieben werden kann:

$$\begin{aligned} \frac{dv_d}{dt} &= -\beta(v_d - v_1)(v_d - v_2) \\ v_{1,2} &= \frac{\gamma}{2} \left(-1 \pm \sqrt{1 + \frac{4\alpha}{\beta\gamma^2}} \right) \end{aligned} \quad (3.87)$$

Dabei ist v_1 die Grenzgeschwindigkeit, die das Korn erreichen würde, während v_2 ein unphysikalischer negativer Fixpunkt der Gleichung 3.87 ist. Die Differentialgleichung lässt sich nun vorteilhaft mit der Methode der Separation der Variablen (Bronstein et al., 2005) bearbeiten, so

dass folgender Ausdruck entsteht:

$$\int \frac{dv_d}{-\beta(v_d - v_1)(v_d - v_2)} = \int dt \quad (3.88)$$

Das Integral auf der linken Seite lässt sich leicht mit einer Partialbruchzerlegung auswerten, so dass man folgenden allgemeinen Ausdruck für die Lösung in impliziter Form erhält:

$$\frac{v - v_2}{v - v_1} = c_0 \cdot e^{-\beta_c \Delta v t} \quad (3.89)$$

Dabei wurde abkürzend $\Delta v = v_2 - v_1$ sowie $c_0 = \frac{v_d(t=0) - v_2}{v_d(t=0) - v_1}$ gesetzt. Mit wenigen algebraischen Transformationen der Gleichung 3.89 gelangt man zu folgenden Ausdrücken für die Geschwindigkeit des Staubkorns $v_d(t)$ und die von ihm zurückgelegte Strecke $s_d(t)$:

$$\begin{aligned} v_d(t) &= v_1 - \frac{\Delta v \cdot e^{\beta \Delta v t}}{c_0 - e^{\beta \Delta v t}} \\ s_d(t) &= \int_0^t v_d(\hat{t}) d\hat{t} + s_0 \end{aligned} \quad (3.90)$$

Unter Berücksichtigung der gemachten Näherungen lässt sich somit analytisch berechnen, wie schnell sich die Körner einer gegebenen Größenklasse in einer gegebenen radialen Schale bewegen. Im nächsten Abschnitt wird mithilfe der Gleichung 3.90 ein numerisches Diskretisierungsverfahren ausgearbeitet, mit dessen Hilfe man den Bewegungen der Staubkörner über den Simulationszeitraum von 10 Myr folgen können wird.

3.10.3 Der Algorithmus für die zeitliche Änderung der Staubbichte

Nachdem im letzten Abschnitt die Lösung der Bewegungsgleichung eines einzelnen Korns abgeleitet wurde, wird es in diesem Abschnitt darum gehen, diese Bewegungsgleichung zu benutzen, um ein numerisches Schema für die Lösung der allgemeinen Bewegungsgleichung 3.79 zu erarbeiten. Es ist nützlich, dazu kurz die relevanten Parameter für den sphärisch symmetrischen QSCC, der in Abschnitt 3.3 eingeführt wurde (vgl. Abbildung 3.2), zu rekapitulieren. Für eine jede radiale Kugelschale S_k gelten die folgenden Gleichungen und Bedingungen:

$$\begin{aligned}\Delta r &= \frac{R_c}{N} \\ r_k &= \Delta r \cdot \left(k - \frac{1}{2}\right), k = 1, \dots, N \\ r_{k,\Delta} &= r_k - \frac{\Delta r}{2} \\ S_k &= \left\{r \mid r_k - \frac{\Delta r}{2} \leq r \leq r_k + \frac{\Delta r}{2}\right\}, k = 1, \dots, N \\ V_k &= 4\pi \cdot \int_{S_k} \hat{r}^2 d\hat{r}\end{aligned}\tag{3.91}$$

Darin bezeichnen wie zuvor N die Gesamtzahl der Schalen im QSCC und R_c dessen Radius. Wenn man nun für eine ausgewählte Schale und ein gewähltes Zeitintervall die Veränderung in einer Schale betrachtet, kommt man leicht zu einem numerischen Ausdruck für die Veränderung der Staubbichte in einer gegebenen Schale S_k . Zur Ableitung dieser Gleichung bezeichnet man mit $N_k(r_d, t)$ die Zahl der Staubkörner mit Radius r_d in der k -ten Schale zum Zeitpunkt t . Ferner bezeichnet man mit $\delta_k(r_d, t, \Delta t)$ den *relativen* Anteil der Körner mit Radius r_d , die sich im Zeitintervall $t, t + \Delta t$ aus der k -ten Schale herausbewegt haben. Mithilfe dieser Definitionen kann man nun leicht die Teilchenzahlerhaltung, die für die Staubkörner gilt, in einer Gleichung formulieren:

$$\begin{aligned}N_k(r_d, t + \Delta t) &= (1 - \delta_k(r_d, t, \Delta t)) \cdot N_k(r_d, t) \\ &\quad + \delta_{k+1}(r_d, t, \Delta t) \cdot N_{k+1}(r_d, t)\end{aligned}\tag{3.92}$$

Diese Gleichung drückt aus, dass die Zahl der Staubkörner, die sich zum Zeitpunkt $t + \Delta t$ in der k -ten Schale befinden, gleich der Summe der Zahl der Körner ist, die sich *nicht* aus der Schale herausbewegt haben, zuzüglich jenen Körnern, die von der $(k + 1)$ -ten Schale in die k -te Schale gelangen konnten. Bei der Ableitung der Gleichung wurde davon Gebrauch gemacht, dass die Bewegung jedes Korns in der Wolke aufgrund der von außen einfallenden Strahlung nur nach innen gerichtet sein kann. Dies führt dazu, dass weiter innen befindliche Schalen nur den Staub von weiter außen liegenden Schalen dazu gewinnen können, was dem zweiten Term in Gleichung 3.92 entspricht. Die Zahl der Staubkörner in der k -ten Schale lässt sich mithilfe der Staubbichte leicht errechnen:

$$N_k(r_d, t) = 4\pi \int_{r \in S_k} n_d(r_d, \hat{r}, t) \cdot \hat{r}^2 d\hat{r}\tag{3.93}$$

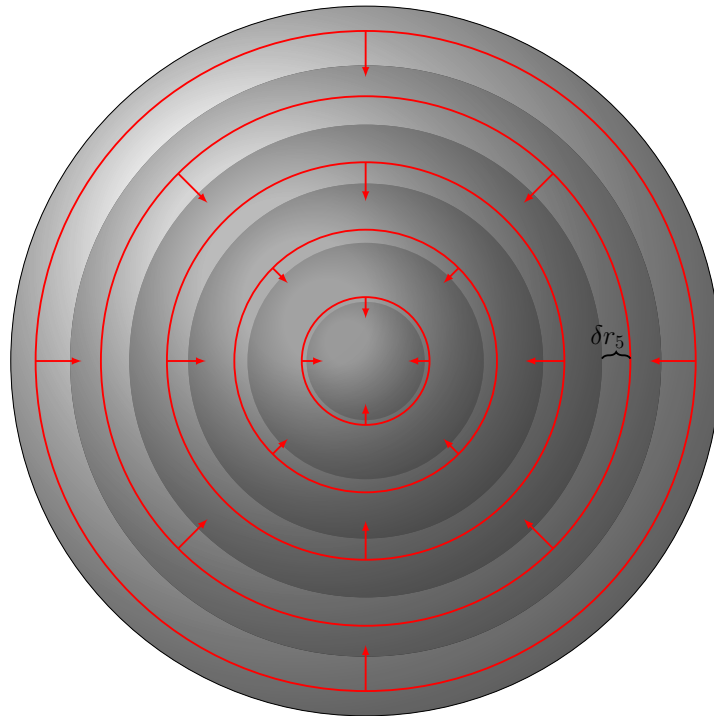


Abbildung 3.14: Schematische Darstellung der Staubbewegung - Die Abbildung zeigt die grundlegende Idee, auf welcher der Algorithmus zur Berechnung der zeitlichen Veränderung der Staubbichte basiert. Für jede radiale Schale lässt sich unter Berücksichtigung der Approximation konstanter physikalischer Parameter in der gesamten Schale eine Distanz ermitteln, jenseits derer die Staubkörner nicht mehr in die nächste Schale transportiert werden können. Dies ist in der Abbildung als rote Linie jeweils kenntlich gemacht. Einmal in der innersten Schale angekommen, kann der Staub nicht mehr heraus transportiert werden. Die in Gleichung 3.82 erforderliche Randbedingung lässt sich als Transport aus einer virtuellen $(N + 1)$ -ten Schale leicht in das Modell integrieren.

Für den relativen Anteil an Staubkörnern $\delta_k(r_d, t, \Delta t)$, die sich im Zeitintervall $[t, t + \Delta t]$ aus der k -ten Schale herausbewegen, lässt sich der folgende Ausdruck mithilfe der Bewegungsgleichung eines Korns ableiten:

$$\delta_k(r_d, t, \Delta t) = \frac{\int_{r \in E_{k,\Delta}} n_d(r_d, \hat{r}, t) dV}{N_k(r_d, t)} \quad (3.94)$$

$$E_{k,\Delta} = \left\{ r \mid r \in S_k : r - r_{k,\Delta} < \int_t^{t+\Delta t} |v_d|(r, \hat{t}) d\hat{t} \right\}$$

Dabei beinhaltet $E_{k,\Delta}$ diejenigen Radien, in denen sich Staubkörner befinden, die im Zeitintervall $[t, t + \Delta t]$ eine Strecke zurücklegen können, die größer als die Distanz zum Rand der Schale ist (vgl. Abbildung 3.2), sich mithin also in der nächsten Schale befinden. Gleichung 3.94 ist in dieser Form nur numerisch durch Lösen der die Menge aller entkommenden Körner $E_{k,\Delta}$ definierenden nichtlinearen Gleichung 3.94 lösbar. Dies wäre mithilfe einer Interpolationsme-

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

thode für die Staubbichte möglich, hätte aber den Nachteil, dass die Bewegungsgleichung für jede Größenklasse und jede Schale explizit gelöst werden müsste. Wenn man allerdings annimmt, dass jede Schale eine konstante Staubbichte besitzt, lassen sich einfache approximative Ausdrücke für die Gleichung 3.94 finden. Die Forderung einer über der ganzen Schale S_k konstanten Staubbichte lässt sich wie folgt ausdrücken:

$$N_k(r_d, t) \approx n_d(r_d, r_k, t) \cdot V_k \quad (3.95)$$

Der entscheidende Vorteil, den die Anwendung der Gleichung 3.95 hat, ist, dass man aufgrund der Annahme einer homogen beschaffenen Schale die *analytische* Lösung der Bewegungsgleichung 3.90 verwenden kann. Die Menge der Staubkörner $E_{k,\Delta}$, die aus der Schale entkommen können, lässt sich somit mithilfe der analytischen Lösung der Bewegungsgleichung 3.90 leicht angeben:

$$\delta_k(r_d, t, \Delta t) \approx \frac{\int_{r_{k,\Delta}}^{\delta r_k(\Delta t)} 4\pi \hat{r}^2 d\hat{r}}{V_k} \quad (3.96)$$

$$\delta r_k(\Delta t) = r_{k,\Delta} + s_d(\Delta t) - s_0$$

Dabei kann man in der ersten Gleichung aus 3.96 die von Null verschiedene Staubbichte $n_d(r_d, r_k, t)$ kürzen sowie die aufgrund der sphärischen Symmetrie geltende Beziehung $dV = 4\pi r^2 dr$ benutzen. Des Weiteren ist in der zweiten der beiden angegebenen Gleichungen 3.96 impliziert, dass die in der jeweiligen Schale vorliegenden physikalischen Parameter für die analytische Lösung der Bewegungsgleichung verwendet werden. Im Folgenden wird für die bessere Lesbarkeit für die in der k -ten Schale vorliegende Staubbichte $n_d(r_d, r_k, t)$ abkürzend der Ausdruck $n_k(r_d, t)$ verwendet werden. Beim Einsetzen der definierenden Approximationsbedingung, Gleichung 3.95, in die die Teilchenzahlerhaltung für die Staubkörner beschreibende Gleichung 3.92, erhält man den folgenden Ausdruck:

$$n_k(r_d, t + \Delta t) \cdot V_k = (1 - \delta_k(r_d, t, \Delta t)) \cdot V_k \cdot n_k(r_d, t) + \delta_{k+1}(r_d, t, \Delta t) \cdot V_{k+1} \cdot n_{k+1}(r_d, t) \quad (3.97)$$

Diese Gleichung lässt sich in eine übersichtliche Form bringen, wenn man noch durch das von Null verschiedene Volumen der k -ten Schale dividiert und den Geometriefaktor G_k einführt:

$$n_k(r_d, t + \Delta t) = (1 - \delta_k(r_d, t, \Delta t)) \cdot n_k(r_d, t) + \delta_{k+1}(r_d, t, \Delta t) \cdot G_k \cdot n_{k+1}(r_d, t) \quad (3.98)$$

$$G_k = \frac{V_{k+1}}{V_k}$$

Die Gleichungen 3.96 und 3.98 stellen die Bewegungsgleichung für die zu einer gegebenen Staubgröße gehörende Teilchenzahldichte der Staubkörner dar. Als explizites Schema ist der Zeitschritt dadurch beschränkt, dass Gleichung 3.96 impliziert, dass $\delta r < r_{k+1,\Delta}$ gilt, da man andernfalls den Staubtransport mehrerer Schalen vermischen und die Teilchenzahlerhaltungsgleichung 3.92, die sich ja nur auf die Nachbarschale bezieht, verletzen würde. Dieses impliziert

wiederum, dass der Zeitschritt in Gleichung 3.96 nicht beliebig gewählt werden kann sondern durch die Größe der Schale beschränkt wird. Für die praktische Anwendung des Algorithmus muss man deshalb fordern, dass für ein gegebenes Δt die folgende Gleichung erfüllt ist:

$$\forall k \Rightarrow \delta r_k(\Delta t) - r_{k,\Delta} \leq \delta_0 \cdot \Delta r \quad (3.99)$$

Dabei ist δ_0 ein empirischer Parameter, der den maximalen relativen Anteil der Staubkörner angibt, der sich pro Zeitschritt Δt aus der Schale herausbewegen kann. Insbesondere bedeutet dies, dass $0 < \delta_0 \leq 1$. Wählt man ein kleines $\delta_0 \approx 0$ bedeutet dies, dass sich nur wenige Staubkörner aus jeder Schale herausbewegen können und viele Zeitschritte für die Integration benötigt werden. Zudem ist die Approximation der Gleichung 3.95 weniger gut, da sich vor allen Dingen Staubkörner bewegen, die sich am zum Kernzentrum gerichteten Rand der Schale befinden. Ein großer Wert $\delta_0 \approx 1$ impliziert andererseits, dass die Bedingung 3.99 durch numerisch auftretende Rundungsfehler relativ leicht verletzt werden kann und auch die Approximation durch Gleichung 3.95 schlechter ist. Es wird deshalb ein empirischen Wert $\delta_0 = 0.5$ verwendet, der offensichtlich einen guten Kompromiss zwischen beiden Extremen darstellt. Natürlich muss die Gültigkeit der Gleichung 3.99 durch einen numerischen Testalgorithmus vorab bestimmt werden. Dies wäre ohne Benutzung der analytischen Lösung (Gleichung 3.90) zu ineffizient, da dann kein hinreichender Vorteil durch die Benutzung eines expliziten Diskretisierungsverfahrens gegeben wäre.

Prinzipiell gestattet der Algorithmus die Veränderung einer Staubverteilung dadurch, dass sich die Staubkörner gemäß der Bewegungsgleichung 3.85 bzw. deren Lösung 3.90 aufgrund unterschiedlich starker Beschleunigungen, wie es die Koeffizienten vorgeben (Gleichung 3.86), auch unterschiedlich bewegen. Wie sich mithilfe der Koeffizienten 3.86 allerdings ablesen lässt, ist die Grenzggeschwindigkeit v_1 gemäß Gleichung 3.87 von der Korngröße *unabhängig*, so dass Verschiebungen in der Staubverteilung nur während des dynamischen Übergangs zur Grenzggeschwindigkeit zu erwarten sind. Wie praktische Rechnungen zeigen, ist die Grenzggeschwindigkeit auf einer typischen Zeitskala für die Bewegung der Staubkörner ($t_g \approx 10 - 100 \text{ kyr}$) für alle Korngrößen schnell erreicht ($t_f < 1 \text{ kyr}$). Dadurch sind diese Effekte für das gegebene Modell vernachlässigbar, und es wird im Folgenden stets von einer repräsentativen Korngröße ausgegangen werden, die auch im chemischen Modell verwendet werden kann. Abschließend wird im nächsten Abschnitt demonstriert, dass die Methode konsistent mit dem veröffentlichten Modell von Whitworth und Bate (2002) ist.

3.10.4 Benchmark mit publiziertem Modell

Obwohl der in Abschnitt 3.10.3 ausgearbeitete Algorithmus für die Veränderung der Staubbichte $\rho_d(r, t)$ aufgrund der Bewegung der Staubkörner mit einigen Unsicherheiten assoziiert ist, bleibt doch zu zeigen, dass er konsistent ist, d.h. zur korrekten Lösung konvergiert. Dazu wird das Resultat des von mir entworfenen Algorithmus mit dem von Whitworth und Bate (2002) verglichen. Da die Berechnungen zur Entwicklung der Häufigkeiten chemischer Spezies

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

mehr CPU-Zeit benötigen als der Bewegungsalgorithmus auch im Falle eines hoch aufgelösten Kerns, wird von einem auch später für die Berechnungen verwendeten, gut aufgelösten (aber nicht hoch aufgelösten) Kern mit ≈ 300 Zellen ausgegangen.

Die grundlegende Idee von Whitworth und Bate (2002) besteht bei der Diskretisierung des Kerns darin, nicht radial sondern nach der *Zahl* der in einer Schale enthaltenen Staubkörner zu diskretisieren. Die Auflösung ist dann durch die Zahl der Staubkörner in einer solchen Schale gegeben. Wählt man nun die gewünschte Zahl der in einer Schale enthaltenen Staubkörner, kann man mithilfe der Bewegungsgleichung eines Staubkorns, Gleichung 3.85, einem repräsentativen Staubkorn folgen, welches sich am Rand der gegebenen Schale befindet. Ein beliebiges Korn in einer Schale liegt somit immer zwischen zwei repräsentativen Körnern (ganz analog zum Fall mit radial festen Schalen in Abb. 3.14), und es ist leicht einzusehen, dass es sich auch nach einem beliebigen Zeitschritt Δt weiterhin zwischen diesen beiden repräsentativen Staubkörnern befinden wird. Da weiterhin bekannt ist, wie viele Staubkörner sich zwischen diesen beiden Staubkörnern befunden haben und immer noch befinden, lässt sich die neue Teilchenzahldichte leicht aus den radialen Positionen der repräsentativen Staubkörner und der konstanten Zahl der Staubkörner errechnen. Der Vorteil dieses Algorithmus liegt darin, dass die Bewegungsgleichung für ein Staubkorn 3.85, unter vollständiger Berücksichtigung der variablen physikalischen Bedingungen, gelöst werden kann, währenddessen es im Falle des von mir entworfenen Lösungsalgorithmus aus Abschnitt 3.10.3 eine Folge lokaler Approximationen sind. Der Nachteil des Algorithmus von Whitworth und Bate (2002) liegt andererseits darin, dass eine große Zahl an Bewegungsgleichungen numerisch zu lösen sind ($N \approx O(7 \cdot 10^4)$), währenddessen man mit dem Algorithmus aus Abschnitt 3.10.3 exakte Lösungen für die lokalen Approximationen ableiten kann. Zudem müssen bei dem von Whitworth und Bate (2002) entworfenen Algorithmus bei fortlaufender Integration zur Erfüllung der Randbedingung Teilchen in das System eingebracht werden, da sich die anderen Teilchen bereits vom Rand entfernt haben, was mit zunehmender Integrationszeit den numerischen Aufwand beträchtlich erhöht. Das für den Vergleich verwendete Gasprofil bzw. das mit $\rho_d/\rho_g = 10^{-2}$ errechnete Staubprofil entspricht dabei dem in Abschnitt 3.4.4 vorgestellten Plummerprofil. Das Resultat des Vergleichs der beiden Methoden ist in Abbildung 3.15 zu sehen. Man sieht, dass - obwohl beide Algorithmen natürlich verschiedene Resultate erbringen - die Übereinstimmung zwischen beiden erhaltenen Lösungen absolut ausreichend ist. Dies hat zwei Gründe: zum einen erbringen höhere radiale Auflösungen bessere Resultate, zum anderen ist es nicht erforderlich, der Staubbewegung mit einer größeren Genauigkeit als der hier vorliegenden maximalen Abweichung von $\approx 2\%$ zu folgen. Ein weiterer Grund liegt im Rechenaufwand, da der Algorithmus mit ähnlichen Parametern wie in Whitworth und Bate (2002) numerisch *weitaus* aufwendiger ist (die Rechenzeit ist dabei um einen Faktor $f \gtrsim 50$ erhöht). Zudem wird eine selbstkonsistente Bewegung weitaus mehr verlangsamt als es in der Berechnung von Whitworth und Bate (2002) der Fall ist. Aus diesen Gründen ist die numerische Konvergenz der Methode hinreichend und der in Abschnitt 3.10.3 entworfene Algorithmus ist verwendet worden.

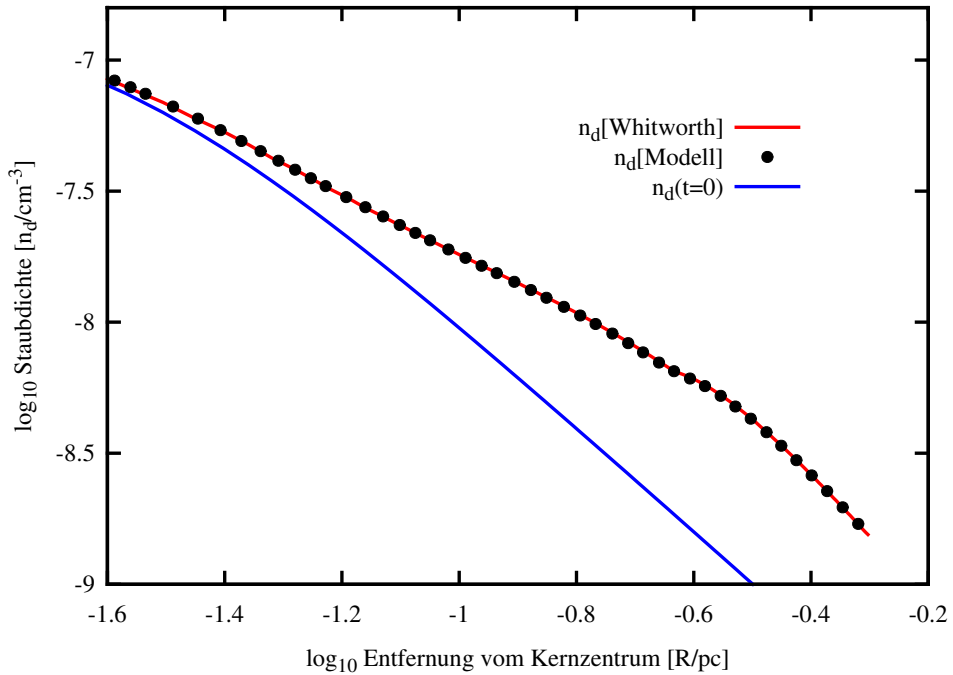


Abbildung 3.15: Vergleich der Resultate des von Whitworth und Bate (2002) publizierten Modells mit dem in dieser Arbeit verwendeten Modell - Die Abbildung zeigt die Staubanreicherung nach einer Simulationszeit von 10 Myr gegenüber der Ausgangsstaubdichte. Die Simulation wurde unter der vereinfachenden Annahme durchgeführt, dass die Staubanreicherung *nicht* zu einer Abschwächung des Strahlungsdrucks führt wie es die Gleichung 3.79 fordert. Der somit gegenüber einem selbstkonsistenten Modell stärkere Staubtransport stellt somit eine verlässliche Abschätzung für die numerische Konvergenz des verwendeten Algorithmus dar. Zur besseren Übersichtlichkeit ist nur ein Teil der numerisch benötigten Gitterpunkte ($N=300$) in der Abbildung dargestellt. Es ist ersichtlich, dass der von mir entworfene Algorithmus mit dem publizierten Modell von Whitworth und Bate (2002) konsistent ist.

3.11 Die Dynamik des Gases im quasi-statischen Grenzfall

Die optischen Tiefen im Kern erhöhen sich aufgrund der Bewegung der Staubkörner, und das zuvor gültige selbst-konsistente Gasprofil $\rho_g(r)$ trifft je nach Stärke der Bewegung nicht mehr zu. Natürlich wäre zur korrekten Behandlung dieser Situation die volle zeitabhängige Lösung der Gleichungen 3.53-3.59 nötig. Da die Staubbewegung jedoch nicht sehr schnell ist (und zudem typische Staubanreicherungen nicht zu groß sind, d.h. $n_d(r, t)/n_d(r, 0) \lesssim 1.7$) kann eine quasi-statische Approximation für das Gas gewählt werden. Die grundlegende Idee liegt dabei darin, dass das Gasprofil sich ebenso wie der Staub nur langsam ändert, und dass insbesondere die Änderung im zentralen Bereich des QSCC so klein ist, dass von einer konstanten Dichte im Zentrum ausgegangen werden kann, d.h. $\rho_g(0, t) \approx \rho_c$. Andererseits wird die Staubanreicherung am Rande des Kerns gemäß der Zustandsgleichung 3.65 zu einer Abnahme des Drucks führen.

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

Das bedeutet wiederum, dass der Kern eine geringfügige Expansionsbewegung durchführt, da die Temperaturänderung in Richtung Kernzentrum geringer ausfällt als am Rand und somit der Druck in den äußeren Regionen etwas stärker abnimmt. Man nimmt deshalb an, dass der Kern seine Ausdehnung ändern wird, wobei die in ihm enthaltene Masse konstant bleibt. Die Masse des Kerns lässt sich mithilfe des bekannten Gasprofils leicht ableiten:

$$M_K(R, t) = 4\pi \cdot \int_0^R \rho_g(r, t) \cdot r^2 dr \quad (3.100)$$

Darin ist $\rho_g(r, t)$ die für das vorhandene Staubprofil $\rho_d(r, t)$ selbst-konsistente Lösung. Die Erhöhung der optischen Tiefen im Kern hat gemäß Abschnitt 3.6 eine Erniedrigung der Dichte zur Folge, da der thermische Druck abnimmt und somit aus der Forderung eines hydrostatischen Gleichgewichts eine Abnahme der Dichte resultiert. Dieses wiederum impliziert, dass bei nicht vorhandener Anpassung des Gasprofils $M_K(R, t) < M_0$ gelten wird, worin M_0 die zu Beginn der Simulation vorliegende Masse des Kerns ist. Da kein Massenfluss des Gases vorliegt, muss die an das Gasprofil gestellte Forderung lauten: $M_K(R, t) = M_0$. Dies lässt sich leicht formalisieren, indem man die folgende Funktion F definiert:

$$F(R) = 4\pi \cdot \int_0^R \rho_g(r, t) \cdot r^2 dr - M_0 \quad (3.101)$$

Die quasi-statische Änderung des Kerns und damit die zeitliche Änderung der Gasdichte $\dot{\rho}_g(r, t)$ sowie die zeitliche Änderung der Ausdehnung des quasi-stationären Kerns $\frac{d}{dt} \mathbf{R}_c$ ist nun näherungsweise durch die Lösung der Gleichung $F(R) = 0$ gegeben. Die praktische Lösung dieser Gleichung geschieht mithilfe des Bisektionsverfahrens (Press et al., 2007) mit geeigneten unteren bzw. oberen Schranken R_u bzw. R_o für die Nullstelle der Gleichung $F(R) = 0$. Typische Änderungen der Ausdehnung (\mathbf{R}_c) des Kerns durch die Anwendung dieses Algorithmus betragen nur einige Prozent, was die Annahme einer quasi-statischen Änderung des Gasprofils rechtfertigt. Die vorhergehenden Betrachtungen entsprechen einer nicht verschwindenden, jedoch kleinen Gasgeschwindigkeit. Zur Berechnung des Staubtransports wird in dieser Arbeit eine durchschnittliche Gasgeschwindigkeit berechnet, mit welcher der Staub radial nach *außen* transportiert wird. Diese Geschwindigkeit ist klein gegenüber der Schallgeschwindigkeit des Gases, was diese quasi-statische Approximation überhaupt erst ermöglicht.

3.12 Zusammenfassung

In den vorhergehenden Abschnitten 3.3-3.11 wurden die in dieser Arbeit zur Berechnung der physikalischen Struktur des QSCC notwendigen numerischen Prozeduren erläutert. In diesem Abschnitt soll nun kurz der praktische Ablauf und das Wechselspiel der Resultate dieser Routinen dargelegt werden. Das Zusammenspiel der verschiedenartigen in diesem Kapitel erläuterten numerischen Verfahren ist dabei in Abb. 3.16 zusammenfassend dargestellt. Der Beginn der Simulation eines QSCC, der potenziell zur Entstehung eines solaren Nebels führen kann,

erfordert zunächst eine Abschätzung seiner Masse. Es ist bekannt, dass der Protostern Masse durch einen bipolaren Ausfluss während seiner Entstehung verliert (Bachiller, 1996; Gålfalk und Olofsson, 2007a,b; van Dishoeck und Blake, 1998), so dass der QSCC, aus dem heraus er entsteht, eine größere Masse besessen haben muss. Da das vorliegende Modell einen solchen Masseverlust weder empirisch noch numerisch beschreiben kann, wird der Masseausfluss vernachlässigt. Der in dieser Arbeit verwendete QSCC muss deshalb eine Masse von $M \approx 1.01 \cdot M_{\odot}$ besitzen, entsprechend der für unser Sonnensystem benötigten minimalen Masse (Desch, 2007). Mithilfe der so ermittelten Masse des QSCC muss dann dessen Konfiguration gefunden werden, d.h. ρ_c und R_c müssen ermittelt werden. Dazu definiert man eine externe Strahlungsintensität G_0 (vgl. Abschnitt 3.9) sowie den Grad der Einbettung, mittels einer gegebenen externer Abschirmung $A_V^{(ext)}$ (vgl. Abschnitt 3.7.4). Anschließend kann man mithilfe der in Abschnitt 3.9 vorgestellten Methodik die Gaskonfiguration ermitteln. Dabei werden Sequenzen von Gas- und Staubkonfigurationen (vgl. Abschnitt 3.8) durchlaufen, die eine Berechnung des Temperatur- und Dichteprofiles erfordern (vgl. Abschnitt 3.6 und 3.7). Ist diese finale Konfiguration gefunden, wird die Simulation der zeitlichen Entwicklung durchgeführt, indem die Bewegung des Staubs (Abschnitt 3.10) und die quasi-statische Änderung der Gaskonfiguration (Abschnitt 3.11) sowie die Berechnung der Änderungen der Häufigkeiten der chemischen Spezies (Kapitels 4) durchgeführt wird.

3. STAUB, GAS UND STRAHLUNG

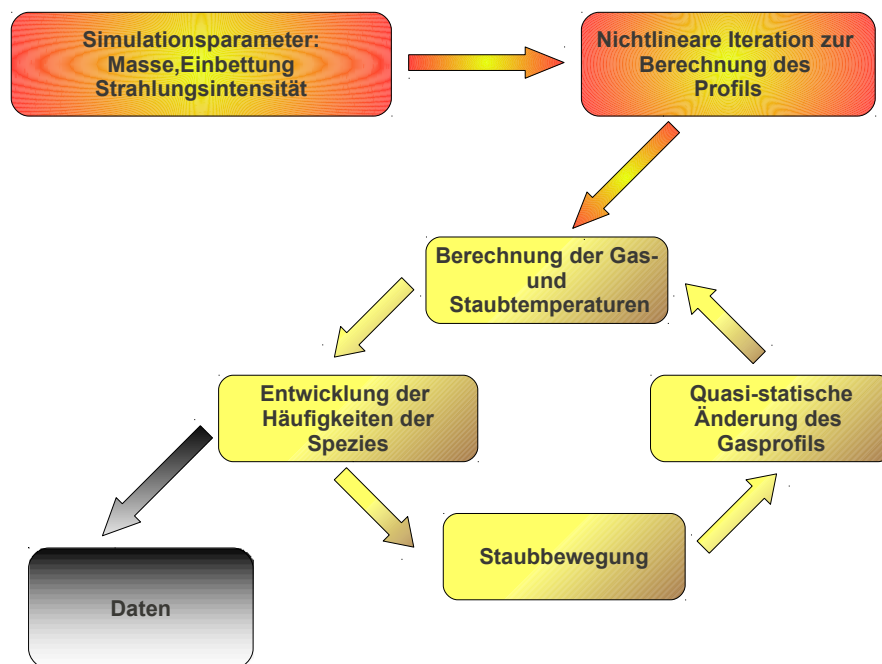


Abbildung 3.16: Schematische Darstellung des Ablaufs der Simulation eines QSCC - Die Abbildung zeigt schematisch die Vorgehensweise bei der Berechnung der zeitlichen Entwicklung eines QSCC. Nach der Wahl der Parameter wird die finale Gaskonfiguration durch die Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems (Gleichung 3.77) ermittelt. Nach Berechnung der Gas- und Staubtemperaturen wird die Entwicklung der Häufigkeiten der chemischen Spezies berechnet, der Staub bewegt sowie die quasi-statische Änderung des Gasprofils ermittelt, bevor der Simulationszyklus erneut beginnt. In dieser Arbeit wird ein Simulationszeitraum von 10 Myr angenommen.

4

Die Entwicklung der Häufigkeiten chemischer Spezies

4.1 Numerische Vorbetrachtungen

Wie in Kapitel 2.3 erläutert wurde, ist die Lösung der chemischen Mastergleichung (CME) praktisch nur mithilfe des Ratenansatzes (ODE) durchführbar. Eine stochastischen Simulation (Abschnitt 2.3.3) war trotz erfolgter Parallelisierung zu rechenintensiv, um Verwendung zu finden, ebenso wie die Lösung der Gleichung mithilfe des Masteransatzes oder der Momentenmethode (Abschnitt 2.3.6). Wie im folgenden erläutert wird, erfordert jedoch auch die Methode der Lösung der CME mithilfe des Ratenansatzes einen hohen numerischen Aufwand.

Der Ratenansatz ist letztlich die näherungsweise Lösung der CME mithilfe eines Systems gekoppelter gewöhnlicher Differentialgleichungen (ODE). Die ODE entsteht dabei aus der Lösung der allgemeinen Mastergleichung CME, Gleichung 2.24, durch Anwendung des thermodynamischen Limits (vgl. Abschnitt 2.3.4.3). Mit den in Kapitel 2.3 eingeführten Reaktionsneigungen \mathbf{a}_i ergibt sich der folgende Ausdruck für das System geschlossener gewöhnlicher Differentialgleichungen:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \sum_{j=1}^M \nu_j a_j(\mathbf{x}) \quad (4.1)$$

Die Lösung dieses Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen, in welchem je eine Variable die zeitliche Entwicklung je einer Spezies darstellt, erfordert aufgrund der durch die Reaktionsneigungen enthaltenen Nichtlinearität ein numerisches Verfahren und insbesondere eine Diskretisierung des Systems. Bei der genaueren Untersuchung des Lösungsverhaltens zeigt sich, dass Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen in zwei Klassen fallen (Hairer et al., 2011; Hairer und Wanner, 2010): Zum einen sind dies Systeme von gewöhnlichen Differentialgleichungen, welche sich mit vertretbarem numerischem Aufwand mit expliziten Methoden der Form:

$$y_n = F(y_{n-1}, y_{n-2}, \dots, h_n, h_{n-1}, \dots) \quad (4.2)$$

4. DIE ENTWICKLUNG DER HÄUFIGKEITEN CHEMISCHER SPEZIES

lösen lassen. Dabei sind y_{n-1}, y_{n-2}, \dots die für die jeweilige Methode erforderlichen diskreten Werte der Veränderlichen $y(t)$ zu gegebenen Zeitpunkten t_{n-1}, t_{n-2}, \dots während h_n, h_{n-1}, \dots die entsprechenden Schrittweiten zwischen je zwei Gitterpunkten darstellen. Es gibt vielfältige Methoden dieser Art (Hairer et al., 2011), auf die hier nicht näher eingegangen wird. Allen Methoden ist jedoch gemein, dass sie bei der Anwendung auf ein System gewöhnlicher Differentialgleichungen, wie es durch Gleichung 4.1 gegeben ist, nicht zur Lösung führen. Der Grund liegt dabei darin, dass alle durch die jeweiligen Reaktionsneigungen a_i gegebenen chemischen Prozesse auf verschiedenen Zeitskalen ablaufen, die für den jeweiligen Prozess charakteristisch sind und sich zudem um mehrere Größenordnungen unterscheiden. Wendet man nun auf ein solches System ein durch Gleichung 4.2 definiertes explizites Verfahren an, so kann ein numerisch erzeugter Verlust der Stabilität auftreten, der entweder die Lösung unmöglich macht, oder das Verfahren extrem aufwändig gestaltet. Beides wird im folgenden kurz anhand von Beispielen erläutert.

Das erste Beispiel ist Dormand (1996) entnommen und lautet:

$$\begin{aligned} \dot{y}_1 &= -2y_1 + y_2 + 2\sin(t) \\ \dot{y}_2 &= 998y_1 - 999y_2 + 999(\cos(t) - \sin(t)) \\ y_1(0) &= 2 \\ y_2(0) &= 3 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Das System besitzt die allgemeine Lösung:

$$\begin{aligned} y_1(t) &= C_1 \exp(-t) + C_2 \exp(-1000t) + \sin(t) \\ y_2(t) &= C_1 \exp(-t) - 998C_2 \exp(-1000t) + \cos(t) \end{aligned} \tag{4.4}$$

Durch die spezielle Anfangsbedingung in Gleichung 4.3 gilt für die reellen Konstanten C_1, C_2 der allgemeinen Lösung $C_1 = 2, C_2 = 0$. Dies bedeutet, dass die Lösungskomponente $f(t) = C_2 \exp(-1000t)$ nicht in der Lösung enthalten ist. Wendet man auf ein solches System ein explizites Verfahren an, wird die korrekte Lösung reproduziert, allerdings ist der numerische Aufwand sehr hoch, da die Schrittweite durch die sehr kleine Zeitskala der Funktion $f(t)$ bestimmt wird, was auch dann gilt, wenn diese in der tatsächlichen Lösung nicht erscheint (Dormand, 1996). Abbildung 4.1 veranschaulicht dies anhand des beschriebenen Beispiels. Ließe sich über den numerischen Aufwand noch diskutieren, ist das erheblich größere Problem der möglichen totalen Verlust der Stabilität. Dies ist in Abbildung 4.2 anhand des sehr einfachen expliziten Euler-Verfahrens und der ebenfalls simplen Differentialgleichung $\dot{y} = -3y$ mit der Anfangsbedingung $y(0) = 3$ veranschaulicht. In diesem Falle überschreitet eine der verwendeten Schrittweiten die Grenze, unterhalb derer die Methode numerisch stabil ist. Das Resultat ist, dass die entstehende numerische Lösung relativ schnell divergiert. Aus diesem Grund lässt sich bedauerlicherweise kein explizites Verfahren für die numerische Lösung der Gleichung 4.1 verwenden.

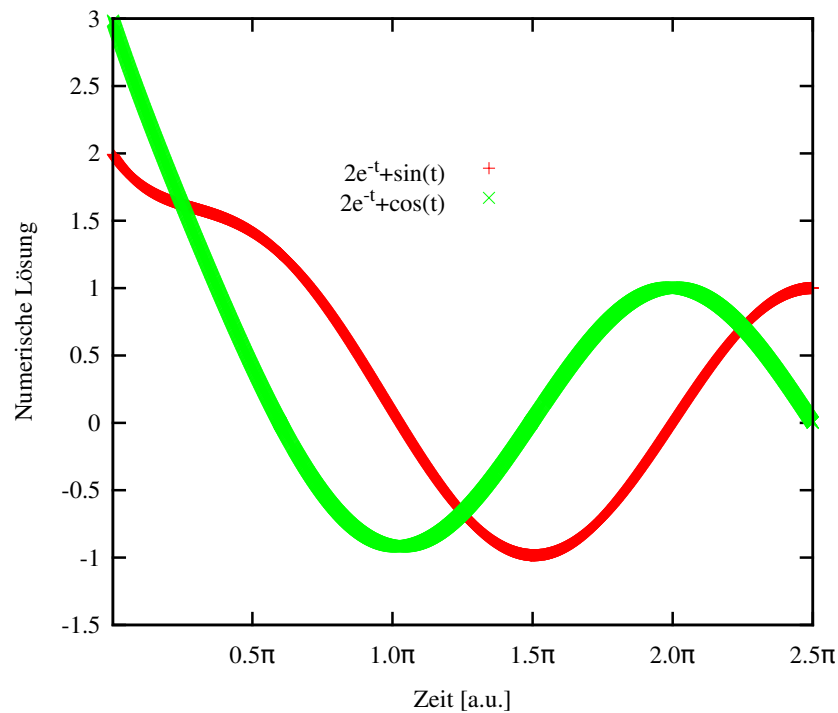


Abbildung 4.1: Exzessiver numerischer Aufwand bei Anwendung eines expliziten Verfahrens auf ein System mit schnellen transienten Lösungen - Die Abbildung zeigt die Lösung des durch Gleichung 4.3 definierten Problems. Dabei wurde ein explizites Runge-Kutta-Paar (Hairer et al., 2011) mit Schrittweitensteuerung (modifiziert nach Press et al. (2007)) verwendet. Das so definierte Verfahren benötigt bei den erforderlichen relativen Genauigkeiten von $\approx 10^{-4}$ rund 3100 Schritte. Vergleichbare implizite Verfahren (Dormand, 1996) benötigen lediglich 20-30 Schritte. Das bedeutet, dass der numerische Aufwand im Falle des impliziten Verfahrens trotz notwendiger Lösung einer nichtlinearen Gleichung (4.5) bedeutend geringer ist.

Implizite Verfahren lassen sich allgemein in der folgenden Form darstellen:

$$y_n = F(y_n, y_{n-1}, y_{n-2}, \dots, h_n, h_{n-1}, \dots) \quad (4.5)$$

Verfahren dieser Art sind numerisch bedeutend stabiler und gestatten wesentlich größere Schrittweiten als explizite Verfahren (Dormand, 1996; Hairer und Wanner, 2010). Der Preis für die gewonnene Stabilität ist die notwendige Auflösung des durch Gleichung 4.5 definierten nichtlinearen Gleichungssystems nach der in jedem Schritt gesuchten Größe y_n . Auf die umfangreichen numerischen Methoden (Dormand, 1996; Hairer und Wanner, 2010) wird dabei nicht im Detail eingegangen. Wichtig für diese Arbeit ist lediglich, dass die numerische Lösung der nichtlinearen Gleichung 4.5 durch das in Kapitel 3 definierte Newton-Raphson Verfahren bzw. durch vergleichbare Ansätze gelöst wird. Da diese Verfahren auf einer lokalen Linearisierung des nichtlinearen Systems, Gleichung 4.5, basieren, erfordern sie auch die lokale Linearisierung des durch Gleichung 4.1 definierten Systems. Abkürzend und allgemein wird für die Gleichung

4. DIE ENTWICKLUNG DER HÄUFIGKEITEN CHEMISCHER SPEZIES

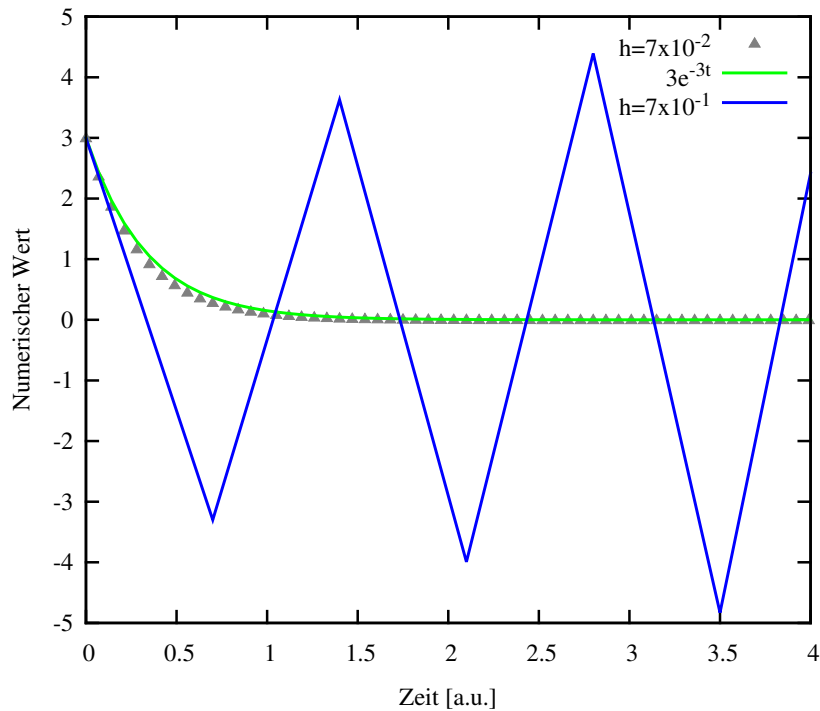


Abbildung 4.2: Kompletter Verlust der Stabilität bei der numerischen Lösung mithilfe expliziter Verfahren - Die Abbildung zeigt den kompletten Verlust der numerischen Stabilität anhand des einfachen Anfangswertproblems $\dot{y} = -3y$; $y(0) = 3$ und des sehr einfachen expliziten Euler-Verfahrens (Hairer et al., 2011). Unterschreitet die Schrittweite eine für das gegebene Problem charakteristische minimale Schrittweite, werden zwangsläufig existierende numerische Rundungsfehler exponentiell verstärkt in die numerische Lösung eingebaut, so dass die Lösung divergiert $y \rightarrow \infty$. Erschwerend kommt hinzu, dass die Abschätzung des Bereichs der absoluten Stabilität für nichtlineare Systeme bedeutend schwerer ist gegenüber dem gezeigten linearen Testproblem.

4.1 die folgende Darstellung definiert:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{G}(t, \mathbf{x}) \quad (4.6)$$

So lässt sich die Jacobi-Matrix J_{ij} als lokale Linearisierung wie folgt darstellen:

$$J_{ij} = \frac{\partial G_i}{\partial x_j} \quad (4.7)$$

Die Lösung des durch die lokale Linearisierung entstandenen linearen Gleichungssystems stellt einen bedeutenden Teil des gesamten numerischen Aufwands dar (Nejad, 2005). Speziell für astrochemische Probleme sind die entstehenden Jacobi-Matrizen nur schwach besetzt, d.h. das Verhältnis von Null verschiedener Einträge zu Nullen liegt dabei typischerweise bei rund 10% - 20%. Es gibt zur Lösung dieser linearen Gleichungssysteme zwei wesentliche Klassen von

Algorithmen: Zum ersten sind dies die direkten Verfahren, zu denen das klassische Gaussverfahren (Blyth und Robertson, 2002a) gehört, oder Verfahren, in denen die Matrix vor der Invertierung zerlegt wird, wie beispielsweise die weit verbreitete LU-Zerlegung (Blyth und Robertson, 2002b). Zum anderen gibt es die Möglichkeit, die Lösung des Gleichungssystems durch iterative Näherung zu berechnen (Saad, 2003). Letztere Methoden sind insbesondere bei den in der Astrochemie üblicherweise schwach besetzten Matrizen effizient (Nejad, 2005), sind dafür aber aufwendiger in der Anwendung. Für diese Arbeit wurden beide Ansätze genutzt, welche jeweils in zwei verschiedenen Software-Paketen enthalten waren: zum einen war dies der *DVO-DE*-Lösungsalgorithmus, welcher auf einer LU-Zerlegung basiert (Brown et al., 1989), zum anderen eine modifizierte Version, welche auf einer iterativen Lösung basiert und im *DVOD-PK*-Lösungsalgorithmus (Brown und Hindmarsh, 1989; Brown et al., 1989; Cash und Gladwell, 1992) implementiert ist. Die Verwendung dieses Verfahrens erforderte das Einbinden eines expliziten Lösungsalgorithmus für das entstehende Gleichungssystem. In dieser Arbeit wurde der Algorithmus des Modells von Semenov et al. (2010) übernommen.

Wie später noch ersichtlich wird, ist für die Berechnung des Self-Shieldings (Lee et al., 1996) eine approximative Berechnung der Column-Density von *H* bzw. *CO* erforderlich. Dies wiederum bedeutet, dass eine numerische Integration über alle Zellen bzw. Schalen und insbesondere auch deren chemischen Häufigkeiten erforderlich ist. Da dies selbst für eine moderate Auflösung des Modells ($N \approx 100$ radiale Schalen) einen stark erhöhten numerischen Aufwand bedeutet, ist es unbedingt erforderlich, dass die Lösung des entstehenden linearen Gleichungssystems einen möglichst geringen Aufwand bedeutet. Die Neuordnung der Spezies beruht dabei auf Nejad (2005). Die Grundidee liegt darin, die Jacobi-Matrix in eine Gestalt zu bringen, bei der die Anwendung der LU-Zerlegung möglichst unaufwendig ist. Dazu werden die Spezies des Systems nach der Zahl ihrer von Null verschiedenen Einträge in der Jacobi-Matrix (Gleichung 4.7) sortiert. Dies führt zu bis zu rund viermal kürzeren Laufzeiten des Programms und stellt damit eine bedeutende Optimierung dar. Der Prozess und die einhergehende Optimierung der Gestalt der Jacobi-Matrix wird dabei anhand des von mir verwendeten Modells von Semenov (Semenov et al., 2010) in Abbildung 4.3 veranschaulicht. Die von mir verwendeten Software-Pakete (Brown und Hindmarsh, 1989; Brown et al., 1989; Cash und Gladwell, 1992; Hindmarsh, 1983) sind von mir getestet worden. Die Testprobleme sind dabei einer vielfach verwendeten (Arnold et al., 2007; González-Pinto et al., 2010) test suite, der Pitagora test suite¹ entnommen worden. Die dabei getesteten Probleme E5, Hires das Oregonator Modell sowie das bekannte Robertson Problem (welches über einen sehr langen Zeitraum integriert wurde) hatten 3-20 abhängige Variablen und konnten korrekt gelöst werden. In den nächsten Abschnitten wird es nun um die praktische Berechnung der Reaktionsneigungen a_i , bzw. um die Erstellung der expliziten Form des System gewöhnlicher Differentialgleichungen (Gleichung 4.6) gehen.

¹zu finden unter: <http://www.dm.uniba.it/~testset/testsetivpsolvers/>

4. DIE ENTWICKLUNG DER HÄUFIGKEITEN CHEMISCHER SPEZIES

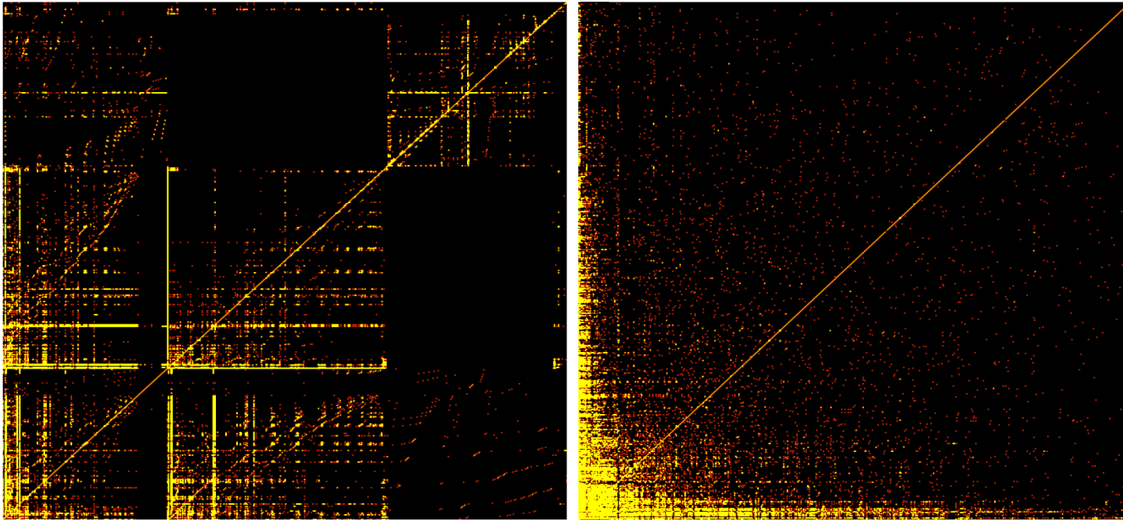


Abbildung 4.3: Bestimmung der näherungsweisen LU-Blockstruktur - Links ist die Jacobi-Matrix des ursprünglichen Sets der ≈ 670 Spezies zu sehen, wobei von Null verschiedene Einträge gelb markiert sind. Rechts dasselbe System nach Sortierung der Spezies, so dass die entstandene Matrix eine Blockstruktur zeigt, die einer LU-Blockstruktur ähnlich ist. Ebenso zu sehen ist, dass die Matrix dünn besetzt ist mit nur rund 13% von Null verschiedenen Einträgen. Die Lösungsmenge des Gleichungssystems wird bei diesem Vorgehen nicht verändert.

4.2 Astrochemische Prozesse

4.2.1 Gasreaktionen

Alle chemischen Umwandlungen, gleich welcher Art, lassen sich prinzipiell in Reaktionen aufteilen, die in der Gasphase ablaufen, und in jene Reaktionen, die in der Staubphase ablaufen. Dabei enthält die Gasphase zu allen Zeiten eine weitaus größere Teilchenanzahl gegenüber der Staubphase. Die daraus resultierenden kinetischen Eigenschaften sind Gegenstand des Kapitels 2.3 gewesen. In diesem Abschnitt wird es darum gehen, die prinzipiell vorliegenden Reaktionsmechanismen zu beschreiben, die in der Gasphase auftreten können, sowie ihre Reaktionsneigungen anzugeben. Die in der Gasphase ablaufenden Reaktionen lassen sich wiederum in stoßaktivierte Zwei-Teilchen-Reaktionen und in strahlungsaktivierte Ein-Teilchen-Reaktionen unterteilen. Für erstere gilt die folgende, mit einem modifizierten Arrhenius-Ansatz berechnete Reaktionsneigung (Smith et al., 2004; Woodall et al., 2007):

$$a_{tr} \propto n_i \cdot n_j \cdot \left(\frac{T_g}{300} \right)^\beta \cdot e^{-\frac{\gamma}{T_g}} \quad (4.8)$$

Dabei sind n_i bzw. n_j die Teilchenzahldichten der an der Reaktion beteiligten Spezies, T_g die Gastemperatur, sowie β und γ reaktionsspezifische Konstanten. Bei den strahlungsgetriebenen

Reaktionen gilt es wiederum zwei Fälle zu unterscheiden. Einerseits gibt es die Reaktionen, die durch harte Teilchenstrahlung getrieben werden. Für Reaktionen dieses Typs ist die Abschwächung der Strahlung durch Gas oder Staub vernachlässigbar, so dass sich die Reaktionen mithilfe der folgenden Reaktionsneigung beschreiben lassen:

$$a_{cr} = \alpha \cdot n_i \quad (4.9)$$

Dabei ist α die Wechselwirkungsrate der kosmischen Strahlung. Je nach Art der zugrunde liegenden Datenbank kann der Wirkungsquerschnitt als temperaturabhängig angenommen werden (Woodall et al., 2007) oder nicht (Smith et al., 2004), woraufhin die Reaktionsneigung die oben geschilderte Form hat. Da das dieser Arbeit zugrunde liegende Modell (Semenov et al., 2010) letzterem Typus entspricht, ist die in Gleichung 4.9 gegebene Form auch die in dieser Arbeit verwendete. Ein zweiter Typus sind die durch die UV-Strahlung induzierten photochemischen Reaktionen. Für diese Reaktionen ist die Absorption durch den Staub bedeutsam, und die Reaktionsneigung hat für diese Reaktionen die folgende Gestalt:

$$a_{ph} \propto n_i \cdot e^{-\gamma \cdot Av} \quad (4.10)$$

Dabei ist γ ein durch die Datenbank gegebener Parameter und Av die visuelle optische Extinktion, die sich wiederum mithilfe der visuellen optischen Tiefe errechnet (Gleichung 3.75). Da diese ihrerseits von der Dichte des Staubs im Kern abhängt (Gleichung 3.9), liegt somit eine relativ starke Kopplung zwischen physikalischen Parametern wie dem Dichteprofil und der Entwicklung der Häufigkeiten chemischer Spezies vor.

4.2.2 Staubreaktionen

Nach der Behandlung der in der Gasphase ablaufenden Reaktionen werden in diesem Abschnitt die auf der Oberfläche der Staubkörner ablaufenden Reaktionen betrachtet. Um auf ein Staubkorn gelangen zu können, muss eine Spezies in der Gasphase mit einem Staubkorn zusammenreffen und auf ihm haften bleiben. Da sich die Konzentration der Staubkörner durch diesen Prozess nicht ändert, handelt es sich im kinetischen Sinne um eine monomolekulare Reaktion mit der folgenden Gestalt der Reaktionsneigung (vgl. Kapitel 2.3):

$$a_{ad}(n_i) \propto \sigma_d \cdot n_d \cdot n_i \quad (4.11)$$

Darin bezeichnet σ_d den Wechselwirkungsquerschnitt des Korns, der Teilchenanzahldichte n_d , mit der Gas-Spezies mit der Häufigkeit n_i . Üblicherweise ist der Wechselwirkungsquerschnitt gleich dem geometrischen Wechselwirkungsquerschnitt, da elektrostatische Effekte typischerweise erst bei vielfach geladenen Körnern und Spezies zum Tragen kommen (Dyson und Williams, 1980), deren Auftreten in den von mir behandelten Kernen relativ unwahrscheinlich ist. Die Bewegung der Spezies auf dem Korn lässt sich wiederum gut als thermisch aktivierte Bewegung von Bindungsstelle zu Bindungsstelle auf dem Korn interpretieren (Biham et al., 2001; Biham und Lipshtat, 2002; Katz et al., 1999), bei leichten Spezies wie H auch durch quan-

4. DIE ENTWICKLUNG DER HÄUFIGKEITEN CHEMISCHER SPEZIES

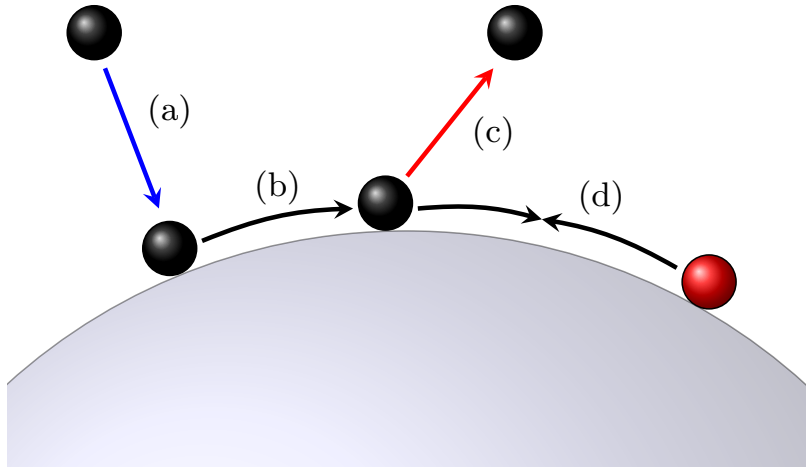


Abbildung 4.4: Schematische Darstellung der möglichen Staubreaktionen - Die Abbildung zeigt die möglichen Staubreaktionen, an denen ein Atom bzw. Molekül beteiligt sein kann. Zunächst muss es aus der Gas-Phase adsorbieren (a), dann kann es sich auf der Stauboberfläche bewegen, indem es entlang der Bindungsstellen wandert (b). Dabei kann es durch Desorption in die Gas-Phase zurückkehren (c) oder auf der Stauboberfläche mit einem anderen adsorbierten Atom bzw. Molekül reagieren (d). Diese Prozesse sind mit unterschiedlichen Raten assoziiert, die im Text erläutert werden.

tenmechanisches Tunneln durch die Barriere (Hasegawa et al., 1992). In völliger Analogie ist die Desorption einer Spezies ein thermisch aktiviertes Loslösen vom Korn. Für beide Prozesse ist eine charakteristische Versuchsfrequenz kennzeichnend, mit welcher das Teilchen in seinem Potentialwall schwingt (Semenov et al., 2010). Der tatsächlich stattfindende Prozess ist dabei komplizierter und lässt sich im Prinzip theoretisch erfassen. Für die praktische Anwendung benötigt man jedoch eine hohe statistische Sicherheit, die sich praktisch nicht erreichen lässt (Alfè und Gillan, 2007). Das in dieser Arbeit zugrundeliegende Modell (Semenov et al., 2010) basiert auf einer Desorption erster Ordnung für die sich die Reaktionsneigung mithilfe der Polanyi-Wigner Gleichung (Alfè und Gillan, 2007; Brown und Bolina, 2007) ermitteln lässt. Dabei handelt es sich um einen monomolekularen Prozess, der entweder thermisch aktiviert eintritt, oder mithilfe eines Teilchen der harten kosmischen Strahlung induziert ist (Hasegawa und Herbst, 1993). Es lassen sich somit die folgenden zwei Reaktionsneigungen für eine Desorption definieren:

$$\begin{aligned} a_{des,t} &= \nu_i \cdot n_i^{(s)} \cdot e^{-\frac{E_{d,i}}{T_d}} \\ a_{des,cr} &\propto \nu_i \cdot n_i^{(s)} \cdot e^{-\frac{E_{d,i}}{70K}} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Darin bezeichnet $a_{des,t}$ die thermisch induzierte Desorption, $a_{des,cr}$ die durch kosmische Strahlung induzierte Desorption, ν_i die für die gegebene Spezies typische Schwingungsfrequenz, $E_{d,i}$ die Bindungsenergie der Spezies in der Bindungsstelle, T_d die Staubtemperatur sowie $n_i^{(s)}$ die auf dem Korn vorliegende Teilchenanzahldichte der entsprechenden Spezies. Trifft eine Spe-

zies, die sich auf dem Korn bewegt, eine andere Spezies, kann eine Reaktion eintreten, deren Reaktionsneigung wie folgt ¹ dargestellt werden kann:

$$a_{\text{reac}} \propto \left(\nu_i \cdot e^{-\frac{E_{h,i}}{T_d}} + \nu_j \cdot e^{-\frac{E_{h,j}}{T_d}} \right) \cdot n_i^{(s)} \cdot n_j^{(s)} \quad (4.13)$$

Darin gelten die gleichen Bezeichnungen wie zuvor, nur dass die Barriere für den Prozess der Bewegung auf dem Korn $E_{h,i}$ sich im allgemeinen von der Barriere für die Desorption $E_{d,i}$ unterscheiden wird. Die Desorptionsbarrieren $E_{d,i}$ sind modellspezifische Konstanten (in dieser Arbeit dem Modell von Semenov et al. (2010) entnommen) während für die Barrieren, die die Bewegung eines Teilchens auf dem Korn bestimmen, unterschiedliche Ansätze verwendet werden können. Typisch ist jedoch die Annahme eines konstanten Faktors, d.h. $E_{h,i} = f \cdot E_{d,i}$. In dem in dieser Arbeit vorliegenden Modell gibt es dabei den Ansatz einer geringen Barriere $f = 0.3$ zuzüglich des quantenmechanischen Tunnelns (Hasegawa et al., 1992) oder einer relativ hohen Barriere $f = 0.77$ mit entsprechender Vernachlässigung eines quantenmechanischen Tunnelns von leichten Spezies auf der Oberfläche (Ruffle und Herbst, 2000). Chemisch ist die Oberfläche an die Gasphase durch Desorption von Spezies, die sich auf der Oberfläche befinden, und Adsorption von Spezies, die sich in der Gasphase befinden, angebunden. Einige Reaktionen - insbesondere die photochemischen Reaktionen - laufen analog zu den entsprechenden Reaktionen in der Gasphase ab und haben deswegen auch analoge Reaktionsneigungen (Semenov et al., 2010). Neben den in diesem und dem vorhergehenden Kapitel diskutieren chemische Reaktionen ist die Anfangshäufigkeit der im System enthaltenen chemischen Spezies von großer Bedeutung. Sie wird deswegen im nächsten Abschnitt gesondert betrachtet, bevor auf die Konstruktion der gewöhnlichen Differentialgleichungen aus den gegebenen Daten eingegangen wird.

4.2.3 Die Selbst-Abschirmung von H_2 und CO

Obwohl die Gas-Spezies für die Energiebilanz von untergeordneter Bedeutung sind (Helling et al., 2000; Marigo und Aringer, 2009; Semenov et al., 2003; Tsuji und Ohnaka, 1995), hat die Photodissoziation von Spezies an Orten, die der externen Strahlungsquelle näher liegen, einen Einfluss auf die Spezies, die sich an weiter von der Quelle entfernt liegenden Orten befinden. Dieser Tatsache wird üblicherweise durch die Verwendung eines parametrischen Faktors $f_s = \exp(-\gamma \cdot A_v)$ Rechnung getragen. Zu den Photodissoziationen der Spezies H_2 und CO gibt es jedoch eine detaillierte Untersuchung von Lee et al. (1996) in welcher der Abschirmungsfaktor nicht-parametrisch als Funktion der Flächendichte der Spezies ermittelt werden kann. Die Flächendichte N_Y der Spezies Y lässt sich aus der Teilchendichte $n_Y(r, t)$ entlang

¹Es gibt neben dem in dieser Arbeit verwendeten sogenannte Langmuir-Hinshelwood Mechanismus alternative Reaktionsmechanismen (Herbst et al., 2005), die in dieser Arbeit wie üblich (Semenov et al., 2010) keine Berücksichtigung finden, da viele experimentell ermittelte Produktionsraten (wie z.B. in Katz et al., 1999) gut mit dem Langmuir-Hinshelwood Mechanismus vereinbar sind.

4. DIE ENTWICKLUNG DER HÄUFIGKEITEN CHEMISCHER SPEZIES

eines gegebenen Pfades Γ wie folgt berechnen:

$$N_Y(\Gamma, t) = \int_{\Gamma} n_Y(r, t) ds \quad (4.14)$$

Die prinzipielle Berechnung dieses Pfad-Integrals wird dabei mit den Algorithmen des Kapitels 3 durchgeführt und soll deshalb hier nicht weiter betrachtet werden. Der Abschirmungsfaktor f_s ist nun im Gegensatz zu dem obigen parametrischen Ausdruck eine Funktion der Flächendichten der Spezies und lässt sich für beide Spezies allgemein wie folgt angeben:

$$\begin{aligned} f_s^{(H_2)} &= F_1(N_{H_2}) \\ f_s^{(CO)} &= F_2(N_{H_2}) \cdot F_3(N_{CO}) \cdot F_4(A_v) \end{aligned} \quad (4.15)$$

Dabei sind $F_i, i = 1, 2, 3, 4$ in Lee et al. (1996) tabellarisch vorgegebene Funktionen. Für die Berechnung der Photodissoziationsrate am Orte r im Kern werden gemäß Gleichung 4.14 die Werte $n_{H_2}(r, t)$ sowie $n_{CO}(r, t)$ an *allen* Orten im Kern benötigt, da sich diese ja auf entsprechenden Pfaden befinden (vgl. Abschnitt 3.4). Da diese Spezies über die chemische Kinetik von allen anderen Spezies abhängen, sind streng genommen sämtliche Spezies an allen radialen Punkten r des Kerns untereinander gekoppelt. Es ist leicht einzusehen, dass eine derartige Simulation mit $N \approx 300 \cdot 2000$ Spezies mit den vorhandenen Ressourcen nicht durchführbar ist. Wie in der Literatur üblich (Wakelam et al., 2006), wird der Faktor deshalb für einen gegebenen Simulationszeitraum berechnet und über diesen Simulationszeitraum hinweg als konstant angesehen. Zu diesem Zweck wird ein logarithmisches Gitter in der Zeit angenommen, um die initiale schnell ablaufende Phase der chemischen Entwicklung qualitativ gut erfassen zu können.

Es bleibt noch zu klären, wie die entsprechenden Flächendichten am Ort r im Kern berechnet werden. Dazu werden neben den im QSCC vorliegenden berechneten Häufigkeiten $n_{H_2}(r, t)$ sowie $n_{CO}(r, t)$ auch die Häufigkeiten am Rande der Einhüllenden $n_{H_2}^{(E)}(t)$ sowie $n_{CO}^{(E)}(t)$ berechnet. Diese Berechnung wird unter konstant gehaltenen physikalischen Bedingungen durchgeführt, da das vorliegende Modell die *veränderlichen* physikalischen Bedingungen am Rand der Einhüllenden nicht hinreichend korrekt wiedergeben kann. Der Vorteil dieses Ansatzes liegt darin, dass der Wert der zwischen dem Rand des QSCC und dem Rand der Einhüllenden vorliegenden Häufigkeiten durch Interpolation näherungsweise bestimmt werden kann. Mithilfe der so vorliegenden Daten zu den Häufigkeiten der Spezies kann nun eine Mittelwertbildung der verschiedenen Pfade erfolgen (vgl. Abbildung 3.3). Da gemäß der in dieser Arbeit gemachten Näherung das von außen auf den Kern einfallende Strahlungsfeld isotrop ist, lässt sich die Wahrscheinlichkeit p , einen Strahl aus dem differentiellen Winkelfeld $\theta, \theta + d\theta$ zu erhalten, als konstant annehmen. Mithilfe der leicht zu ermittelnden (Ghahramani, 2005) Wahrscheinlichkeitsdichte $p(\theta) = \frac{1}{\pi}$ lässt sich die durchschnittlich vorhandene Flächendichte der Spezies Y

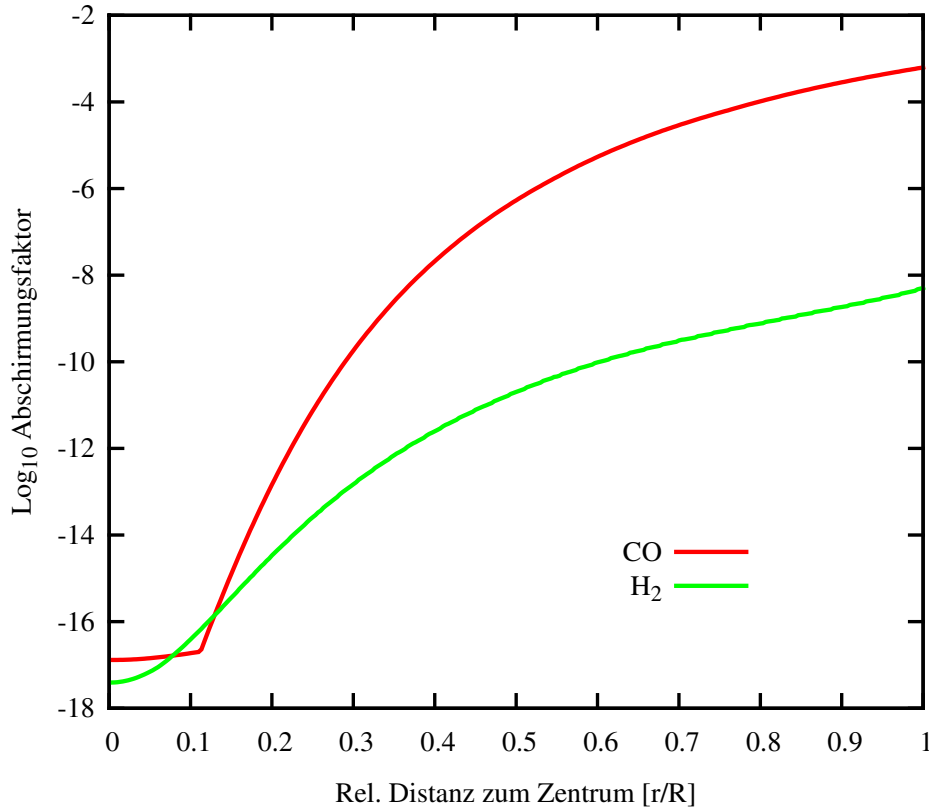


Abbildung 4.5: Radiale Abhängigkeit der Abschirmungsfaktoren für H_2 und CO - Die Abbildung zeigt den typischen radialen Verlauf der Abschirmungsfaktoren für H_2 und CO in einem QSCC.

am Ort r zum Zeitpunkt t im Kern leicht als Mittelwert über diese Verteilung angeben:

$$\langle N_Y \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi N_Y(\Gamma(\theta), t) d\theta \quad (4.16)$$

Durch Einsetzen dieses Ausdrucks in Gleichung 4.15 lassen sich die entsprechenden Abschirmungsfaktoren dann leicht berechnen. Nach Ablauf eines Zeitschrittes im logarithmischen Gitter werden die Abschirmungsfaktoren neu berechnet und für die Berechnung der chemischen Kinetik verwendet. Ein typischer Verlauf der Werte der Abschirmungsfaktoren in einem QSCC ist in Abbildung 4.5 gezeigt.

4.3 Die Häufigkeit chemischer Spezies zu Simulationsbeginn

Man benötigt für die Entwicklung der Häufigkeiten der chemischen Spezies deren Werte zu Beginn der Simulation. Diese sind auch deshalb von Bedeutung, da für typische Anfangswerte die Werte der Häufigkeiten von chemischen Spezies weit entfernt vom chemischen Gleichgewicht sind, und sich dieses Gleichgewicht in der typischen Lebensdauer nicht einstellen kann (Smith, 2008). Neben theoretischen Überlegungen, die auf kosmologischen Modellen basieren (Black, 2006; Olive et al., 2000), gibt es natürlich zur Abschätzung der Häufigkeiten der zu Beginn der Simulation vorhandenen Spezies viele Daten von Beobachtungen sowohl des Sonnensystems (Basu und Antia, 2008) als auch des ISM, aus welchem sich letztlich erst ein Kern formen kann (siehe z.B. Savage und Sembach, 1996). Diese Anfangsbedingungen unterscheiden sich im wesentlichen aus zwei Gründen: Zum ersten ist ein Teil der schweren Elemente in Staubkörnern eingeschlossen und der Beobachtung im interstellaren Medium nicht zugänglich. Währenddessen werden diese Elemente in der Sonne im Plasma vorliegen und der Beobachtung somit zugänglich sein. Zum zweiten wiesen aufgrund des Alters der Sonne von ≈ 4.6 Milliarden Jahren ihre Vorläufer einen geringeren Anteil schwerer Elemente auf, da es zuvor weniger Überreste von älteren Sternen gab, welche diese Elemente erst in ihrer späteren Lebensphase entstehen ließen. Für die Betrachtungen in dieser Arbeit sind jedoch nicht alle Elemente gleichermaßen von Bedeutung. So sind beispielsweise die Häufigkeiten von *Na*, *Mg* und *Fe* von geringerer Bedeutung, da für uns einerseits speziell die präbiotischen Moleküle von Bedeutung sein werden und andererseits die Häufigkeit dieser Elemente auch relativ gering ist (Albertsson et al., 2013; Bryans et al., 2009; Semenov et al., 2010; Wakelam et al., 2006).

Von großer Bedeutung für die Häufigkeit vieler präbiotischer Spezies sind die Häufigkeiten der Elemente Kohlenstoff und Sauerstoff (Kupper et al., 2012; Wakelam et al., 2006). Die genaue Häufigkeit dieser Elemente ist dabei aus den oben genannten Gründen relativ schwierig zu ermitteln und variiert demzufolge je nach Quellenangabe (Albertsson et al., 2013; Semenov et al., 2010; Wakelam et al., 2006). In dieser Arbeit wurden die in Tabelle 4.1 gezeigten Konzentrationen von Albertsson et al. (2013) übernommen, da diese den Bedingungen bei der Entstehung des solaren Nebels relativ gut entsprechen sollten. Es ist bekannt, dass die Variation des Verhältnisses von Kohlenstoff zu Sauerstoff einen großen Einfluss auf die präbiotische Chemie besitzt (Kupper et al., 2012; Semenov et al., 2010; Wakelam et al., 2006). Um diesen Effekt in meiner Arbeit berücksichtigen zu können, werden - der Methodik von Wakelam et al. (2006) bzw. Kupper et al. (2012) folgend - die Berechnungen mit einem Verhältnis $C/O \approx 0.4$ sowie mit einem Verhältnis $C/O = 1.2$ durchgeführt. Dabei werden für den ersten Fall die Konzentrationen von Albertsson et al. (2013) übernommen und in den Simulationen verwendet, während im zweiten Fall die Konzentration von *C* entsprechend angepasst wird (vgl. Tabelle 4.1).

Tabelle 4.1: Konzentrationen der Spezies zu Beginn der Simulation

Spezies	Häufigkeit ($\log_{10}(N_X/N_H) + 12$)
H_2	11.70
He	10.99
H	9.30
O	8.26
C	7.90 ^a
N	7.39
HD	7.18
S	4.96
X	4.79
Mg	4.04
Si	3.99
Fe	3.44
Na	3.35

Notes.

^(a) Die angegebene Häufigkeit entspricht einem C/O Verhältnis von ≈ 0.4 . Für den Fall eines C/O Verhältnis von 1.2 entspricht die Häufigkeit von C dem Wert 8.33

4.4 Die Konstruktion des Systems der ODEs

Um nachvollziehen zu können, auf welche Art und Weise das System gewöhnlicher Differentialgleichungen konstruiert wird, ist es hilfreich, kurz auf die Gestalt der verwendeten Datenbank einzugehen. Es gibt dabei zwei grundlegende für diese Arbeit relevante Astrochemische Datenbanken. Zum einen ist dies die in Manchester entwickelte UMIST-Datenbank (Le Teuff et al., 2000; Millar et al., 1997; Woodall et al., 2007), zum zweiten die in den Vereinigten Staaten entwickelte OSU-Datenbank (Smith et al., 2004), sowie deren Derivate wie bspw. die KIDA-Datenbank (Wakelam et al., 2012). Diese Arbeit basiert auf dem Modell von Semenov et al. (2010), welches seinerseits auf der OSU-Datenbank basiert, so dass diese Arbeit letztlich eine Datenbank des OSU-Typus verwendet. Die Datenbank enthält eine Liste der Reaktionen, wobei für jede Reaktion die Spezies ebenso wie die Reaktionsparameter aufgelistet sind. Eine genauere Beschreibung findet sich in der Legende der Abbildung 4.6. Anhand dieser so gegebenen Datenbank wird nun auf die explizite Berechnung bzw. Erstellung des Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen eingegangen. Zudem wird die Einbindung von Reaktionen, welche Isotope enthalten, beschrieben. Wie im Abschnitt 2.3 gezeigt wurde, lassen sich die Reaktionsneigungen a_i für bimolekulare und monomolekulare Reaktionen wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned} a_m &= k_0 \cdot x_i \\ a_b &= k_1 \cdot x_i \cdot x_j \end{aligned} \tag{4.17}$$

4. DIE ENTWICKLUNG DER HÄUFIGKEITEN CHEMISCHER SPEZIES

Dabei sind k_0, k_1 empirisch oder theoretisch ermittelte Konstanten, die man der verwendeten astrochemischen Datenbank (Abbildung 4.6) entnimmt. Zur tatsächlichen Konstruktion des

R_1	R_2	P_1	P_2	k_1	k_2	k_3	k_4	I	T_l	T_u
HNC+	C	CH+	CN	0.11000E-08	0.00000E+00	0.00000E+00	0.11000E-08	2	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	S	S+	HNC	0.57000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.57000E-09	2	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	S	HS+	CN	0.57000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.57000E-09	2	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	C2	C2H+	CN	0.84000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.84000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	CH	CH2+	CN	0.63000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.63000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	H2	HCNH+	H	0.70000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.70000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	NH	NH2+	CN	0.65000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.65000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	NO	NO+	HNC	0.81000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.81000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	O2	NO+	HCO	0.90000E-10	0.00000E+00	0.00000E+00	0.90000E-10	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	OH	H2O+	CN	0.63000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.63000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	C2H	C2H2+	CN	0.79000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.79000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	CH2	CH3+	CN	0.87000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.87000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	H2O	H3O+	CN	0.85000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.85000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	HCN	HCNH+	CN	0.16000E-08	0.00000E+00	0.00000E+00	0.16000E-08	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	HCO	HCNH+	CO	0.37000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.37000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	HCO	H2CO+	CN	0.37000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.37000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	NH2	NH3+	CN	0.90000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.90000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	H2CO	H3CO+	CN	0.10000E-08	0.00000E+00	0.00000E+00	0.10000E-08	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNC+	NH3	NH3+	HNC	0.17000E-08	0.00000E+00	0.00000E+00	0.17000E-08	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	C	CH+	NO	0.10000E-08	0.00000E+00	0.00000E+00	0.10000E-08	2	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	O	NO2+	H	0.10000E-11	0.00000E+00	0.00000E+00	0.10000E-11	2	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	S	HS+	NO	0.11000E-08	0.00000E+00	0.00000E+00	0.11000E-08	2	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	C2	C2H+	NO	0.82000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.82000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	CH	CH2+	NO	0.44000E-08	-0.50000E+00	0.00000E+00	0.44000E-08	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	CO	HCO+	NO	0.27000E-09	-0.50000E+00	0.00000E+00	0.27000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	NH	NH2+	NO	0.38000E-08	-0.50000E+00	0.00000E+00	0.38000E-08	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	NO	NO+	HNO	0.36000E-09	-0.50000E+00	0.00000E+00	0.36000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	OH	H2O+	NO	0.46000E-08	-0.50000E+00	0.00000E+00	0.46000E-08	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	C2H	C2H2+	NO	0.20000E-08	-0.50000E+00	0.00000E+00	0.20000E-08	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	CH2	CH3+	NO	0.71100E-09	-0.50000E+00	0.00000E+00	0.71100E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	CO2	HCO2+	NO	0.10000E-09	0.00000E+00	0.00000E+00	0.10000E-09	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	H2O	H3O+	NO	0.21000E-08	-0.50000E+00	0.00000E+00	0.21000E-08	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	HCN	HCNH+	NO	0.72000E-08	-0.50000E+00	0.00000E+00	0.72000E-08	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	HCO	H2CO+	NO	0.10000E-08	-0.50000E+00	0.00000E+00	0.10000E-08	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	HNC	HCNH+	NO	0.65200E-08	-0.50000E+00	0.00000E+00	0.65200E-08	19	0.00000E+00	0.41000E+05
HNO+	NH2	NH3+	NO	0.22000E-08	-0.50000E+00	0.00000E+00	0.22000E-08	19	0.00000E+00	0.41000E+05

Abbildung 4.6: Vereinfachter Auszug der verwendeten Datenbank - Die Abbildung zeigt einen Ausschnitt der Datenbank (Semenov et al., 2010), die bzw. deren Erweiterung (Abschnitt 4.5) in dieser Arbeit verwendet wurde. Die Datenbank, dargestellt im generalisierten Format des Autors, enthält die Einträge von 2 Reaktanten (Spalten R_1, R_2), bis zu 5 Produkte in den Spalten P_1 bis P_5 sowie 4 Reaktionskonstanten (k_1, \dots, k_4), einen numerisch identifizierbaren Typ der Reaktion (I) und eine untere (T_l) sowie eine obere Grenze (T_u) für den Temperaturbereich, in welchem die entsprechende Reaktion gültig ist. Da nur wenige Reaktionen mehr als 2 Produkte beinhalten und keine der gezeigten Auswahl, sind hier nur zwei Produkte gezeigt. Mithilfe der gezeigten Datenbank lässt sich das System der gewöhnlichen Differentialgleichungen unmittelbar konstruieren.

Systems gekoppelter Differentialgleichungen wurde nun wie folgt vorgegangen: Zunächst erstellt man mit einer Liste der Spezies S_1, S_2, \dots eine Zuordnung einer jeden Spezies zu einem entsprechenden Index $1, 2, \dots$. Anschließend liest man die Datenbank, 4.6, ein und bestimmt eine Matrix von Indizes $I(7, N_R)$, indem man jeder Reaktion $1 \leq j \leq N_R$ des Systems und jeder teilnehmenden Spezies (maximal 2 Reaktanten und maximal 5 Produkte) ihre entsprechende Indexzahl zuordnet. Nicht besetzten Einträgen wird eine Null zugewiesen. Die für eine

beliebige Reaktion zutreffende Reaktionsneigung lässt sich dann wie folgt berechnen:

$$a_j(\mathbf{x}) = k_j \prod_{i=1}^2 F(I_n(i, j), \mathbf{x}) \quad (4.18)$$

Dabei ist i ein Zählindex für die Teilnehmer einer Reaktion, d.h. der Einträge einer Zeile in der Datenbank (Abbildung 4.6), k_j die der Datenbank entnommene Reaktionskonstante, und $F(n, \mathbf{x})$ eine Indexfunktion für die gilt:

$$F(n, \mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{x}(n) & : n \neq 0 \\ 1 & : n = 0 \end{cases} \quad (4.19)$$

Mit der so berechneten Reaktionsneigung benötigt man zur vollständigen Berechnung der rechten Seite der Gleichung 4.1 den stöchiometrischen Vektor ν_j . Den Vektor explizit zu berechnen ist höchst ineffizient, da er notwendigerweise einen sehr hohen Anteil an Nullen und damit nicht bedeutenden Einträgen enthält. Es ist weitaus sinnvoller, lediglich den Teil des stöchiometrischen Vektors zu konstruieren, der von Bedeutung ist. Dazu muss man beachten, dass Reaktanten mit Index $i \leq 2$ in einer Reaktion reagieren und damit abnehmen, während Produkte mit $i \geq 3$ produziert werden. Dies lässt sich mit einer weiteren Indexfunktion $\mathbf{H}(i, j)$ formalisieren:

$$\mathbf{H}(i, j) = \begin{cases} -\mathbf{e}_l & : l = I(i, j), l \neq 0, i \leq 2 \\ \mathbf{e}_l & : l = I(i, j), l \neq 0, i \geq 3 \\ 0 & : l = I(i, j), l = 0 \end{cases} \quad (4.20)$$

Darin bezeichnet \mathbf{e}_l den l -ten Einheitsvektor des Systems. Nun kann man die Berechnung des Systems gewöhnlicher Differentialgleichungen mithilfe der Indexfunktionen $F(i, \mathbf{x})$, sowie $\mathbf{H}(i, j)$ und der Populationen der Spezies \mathbf{x} wie folgt angeben:

$$\begin{aligned} a_j(\mathbf{x}) &= k_j \prod_{i=1}^2 F(I(j, i), \mathbf{x}) \\ \frac{d\mathbf{x}}{dt} &= \sum_{j=1}^{N_R} \sum_{i=1}^7 \mathbf{H}(i, j) \cdot a_j(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (4.21)$$

Mithilfe der Gleichung 4.21 lässt sich das System der Differentialgleichungen, welche die Entwicklung der Häufigkeiten der chemischen Spezies beschreiben, aufstellen. Führt man noch eine Differentialfunktion $D(i, j, l, \mathbf{x})$

$$D(i, j, l, \mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{1}{\mathbf{x}(l)} & : l = I(i, j) \\ 0 & : l \neq I(i, j) \end{cases} \quad (4.22)$$

4. DIE ENTWICKLUNG DER HÄUFIGKEITEN CHEMISCHER SPEZIES

ein, lässt sich die l -te Spalte der Jacobi-Matrix (Gleichung 4.7) analog angeben:

$$\begin{aligned} a_j(\mathbf{x}) &= k_j \prod_{i=1}^2 F(I(j, i), \mathbf{x}) \\ \mathbf{J}_l &= \sum_{j=1}^{N_R} \sum_{i=1}^7 \mathbf{H}(i, j) \cdot a_j(\mathbf{x}) \cdot D(i, j, l, \mathbf{x}) \end{aligned} \quad (4.23)$$

Der Nachteil dieses Ansatzes ist, dass das System von Differentialgleichungen nur in der Laufzeitumgebung des Programms zur Verfügung steht, ebenso wie die Jacobi-Matrix, welche bei jedem Aufruf durch die verwendeten Lösungsalgorithmen (Brown und Hindmarsh, 1989; Brown et al., 1989; Cash und Gladwell, 1992; Hindmarsh, 1983) neu berechnet werden muss. Laufzeitvergleiche mit externen Funktionen, bei denen die Summen in den Gleichungen 4.21 und 4.23 nur einmalig bei deren Konstruktion verwendet werden müssen, waren meist nicht effizienter im Vergleich zu den nur in der Laufzeitumgebung zur Verfügung stehenden Funktionen.

4.5 Isotopenchemie

Alle in Abschnitt 4.2 benannten astrochemischen Datenbasen wie auch die von mir verwendete (basierend auf Semenov et al. (2010)) enthalten keine (oder nur relativ wenige) Daten zu Reaktionen, in denen Isotope vertreten sind. Wie unten ersichtlich wird, gibt es zu den Reaktionen der Astrochemie, die Isotope beinhalten, auch weniger Daten, und es liegen weniger Experimente vor. Aus der Vielzahl der Isotope aller Elemente, die auch in der Astrochemie und für dieses Modell von Bedeutung sind, sind nicht alle Isotope auch für die Untersuchung der präbiotischen Spezies bedeutsam. Aufgrund bereits vorliegender Daten und aufgrund ihrer Bedeutung wird in dieser Arbeit das Wasserstoff-Isotop Deuterium ^2H , das in dieser Arbeit durchgängig mit **D** bezeichnet werden wird, sowie das schwere Isotop des Stickstoffs, ^{15}N , welches in dieser Arbeit durchgängig mit **X** bezeichnet wird, untersucht.

Die Daten zu Reaktionen, in welchen Isotope beteiligt waren, sind im Verhältnis zu der von mir modifizierten Datenbank von Semenov et al. (2010) nicht sehr umfangreich, sowohl was das Deuterium betrifft (Albertsson et al., 2013; Brown und Rice, 1986a,b; Flower et al., 2004; Hiraoka et al., 2005; Howe und Millar, 1993; Howe et al., 1994; Millar et al., 1989; Osamura et al., 2005; Roueff et al., 2007; Tielens, 1983; Walmsley et al., 2004; Willacy, 2007) als auch was das schwere Isotop des Stickstoffs betrifft (Rodgers und Charnley, 2008a,b; Terzieva und Herbst, 2000). Dies würde bedeuten, dass man nicht alle der besonders interessierenden Isotope mit einschließen könnte. Um dieses Problem zu umgehen, gleichzeitig aber die bestehenden Daten nutzen zu können, wurde die Idee von Albertsson et al. (2013) aufgegriffen und etwas modifiziert auf die existierende Datenbank angewendet. Die grundlegende Idee (Albertsson et al., 2013) besteht darin, die Daten existierender Reaktionen für isotopisch modifizierte

Spezies (d.h. Spezies, welche Isotope anstelle ihrer ursprünglichen Zusammensetzung enthalten) zu übernehmen und so eine neue Datenbank zu erzeugen. Dabei wird nur die kinetische Form der Reaktionsneigung übernommen was aufgrund unterschiedlicher Aktivierungsenergien z.t. abweichende Reaktionsneigungen bedingt. Dies wird in einem späteren Abschnitt weiter ausgeführt. Obwohl der beschriebene Ansatz grundsätzlich nicht kompliziert ist, so ist die konkrete Erstellung der Datenbank aufgrund der Fülle an Reaktionen ($N_R \approx 8100$) der ursprünglichen Datenbank (Semenov et al., 2010) nicht trivial und muss automatisiert geschehen. Im folgenden Absatz wird deshalb auf die verwendete Methodik eingegangen.

Um die Ableitung für das automatische Erstellen von isotopisch modifizierten Spezies darzulegen, betrachtet man zunächst nur das Isotop Deuterium, da die Ableitung im Falle des schweren Isotops des Stickstoffs vollkommen analog ist. Um den Prozess zu veranschaulichen, betrachtet man weiterhin als konkretes Beispiel die Spezies H_2CO+ . Aus dieser Spezies entstehen - je nachdem wie viele und welche Wasserstoff-Atome ersetzt werden - unterschiedliche isotopisch modifizierte Spezies. Um einen generellen automatisierten Prozess zu entwickeln, formalisiert man dies dadurch, dass man alle anderen Elemente ignoriert und folgende Korrespondenz definiert:

$$H_2CO+ \Leftrightarrow (H, H)^T \quad (4.24)$$

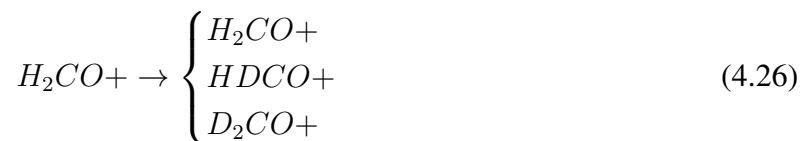
Der rechts stehende Vektor, der genauso viele Einträge hat wie die links stehende Spezies Wasserstoff-Atome, ist dabei die Basis der Betrachtung, da in ihm die entsprechenden Ersetzungen durchgeführt werden können. Dazu wird die Variationsfunktion $P(v)$ eingeführt, worin v der rechts-stehende Vektor der Gleichung 4.24 ist. Die Variationsfunktion erzeugt aus einem Vektor jede durch Ersetzung mögliche Kombination (inklusive der Originalkombination). Dies lässt sich an dem gegebenen Beispielvektor der Dimension 2 veranschaulichen:

$$P((H, H)^T) = \begin{cases} (H, H)^T \\ (D, H)^T \\ (H, D)^T \\ (D, D)^T \end{cases} \quad (4.25)$$

Das mithilfe von Vertauschungs-Operatoren entwickelte Verfahren zur konkreten Berechnung der Ergebnisse der Variationsfunktion für beliebige Dimensionen basiert letztlich auf einem Pfaddiagramm, welches in der Stochastik bei dem Problem des Ziehens aus einer Urne mit Zurücklegen bekannt ist (Ghahramani, 2005). Im Resultat werden sehr viele redundante Kombinationen auftreten, wie bspw. das zweite und das dritte Resultat der Variationsfunktion, Gleichung 4.25. Unter Berücksichtigung der Konventionen bei der Namensgebung von Spezies, wie sie bei vorliegenden Daten benutzt wurden (Albertsson et al., 2013; Howe und Millar, 1993), ergeben

4. DIE ENTWICKLUNG DER HÄUFIGKEITEN CHEMISCHER SPEZIES

sich die folgenden Resultate für die Isotope der ausgewählten Spezies:



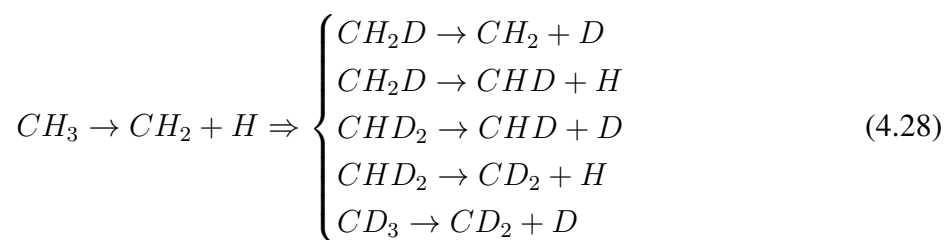
Je mehr Wasserstoff-Atome eine Spezies enthält, desto mehr redundante Kombinationen treten auf, und nur ein relativ geringer Anteil der 2^n Resultate der Variationsfunktion, die auf einen Vektor der Länge n angewendet wird, führt letztlich zu voneinander verschiedenen Spezies. Der große Vorteil eines Formalismus, der die Variationsfunktion beinhaltet, liegt aber darin, dass er neben der Anwendung auf eine einzelne Spezies (Gleichung 4.24) in völliger Analogie auch auf eine gesamte Reaktion angewandt werden kann:



Die resultierenden Ergebnisse der Anwendung der Variationsfunktion auf den rechtsstehenden Vektor der Gleichung 4.27 werden anschließend auf die folgenden Bedingungen hin überprüft:

- Führen Vertauschungen nicht zu bereits bekannten Reaktionen?
- Wird in einer Reaktion *erster* Ordnung mit einem Produkt nicht die Spezies geändert ?
- Gehorcht die resultierende Reaktion den Erhaltungssätzen(Massenerhaltung,...)?

Werden die obengenannten Bedingungen angewendet, ist die komplette Konstruktion aller aus einer isotopisch modifizierten Reaktion entstehenden Reaktionen möglich. Im Falle des in Gleichung 4.27 benutzten Beispiels führt das zu den folgenden Reaktionen:



Die wiederholte Anwendung dieses Algorithmus, basierend auf der Variationsfunktion, kann in dieser Weise auf jede in der Originaldatenbank vorhandene Reaktion angewandt werden, so dass das Problem der Erzeugung der isotopisch modifizierten Reaktionen damit vollständig gelöst ist. Die Erstellung der finalen Datenbank erfordert ein wenig weitere Arithmetik und ein Vorgehen, das sich zum Teil von dem von Albertsson et al. (2013) unterscheidet, was Gegenstand des nächsten Abschnittes sein wird.

Würde man den obig geschilderten Algorithmus direkt auf die vorliegende Original-Datenbank anwenden, so würde eine bedeutende Zahl an Spezies entstehen, die für die interessierenden

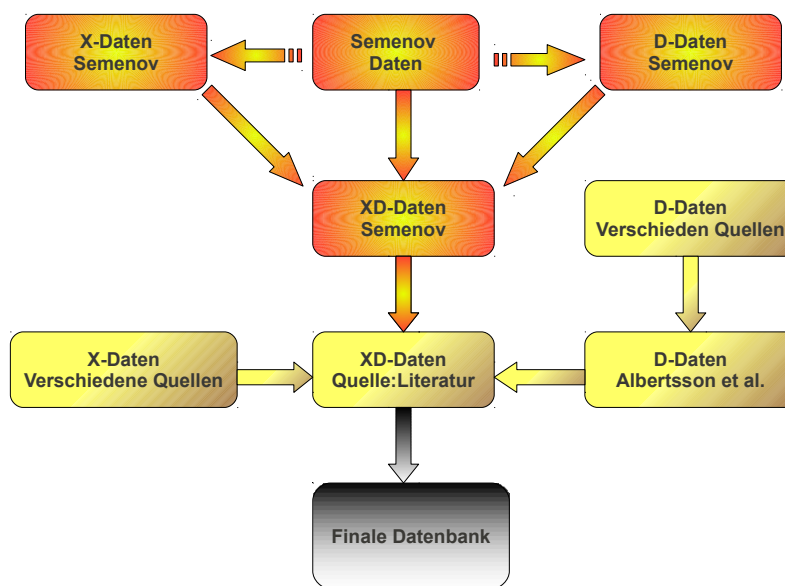


Abbildung 4.7: Schematische Darstellung der Konstruktion der finalen Datenbank - Die Abbildung zeigt schematisch den Prozess der Konstruktion der finalen Datenbank aus den ursprünglich vorliegenden Daten. Nicht durchgehende Pfeile symbolisieren die Anwendung des Algorithmus zur Konstruktion isotopisch veränderter Reaktionen. Wichtig ist, dass der Formalismus so konstruiert ist, dass man - falls identische Reaktionen auftreten - eine Reihenfolge an benutzten Präferenzen hat, wenn man entscheidet, welche Reaktion der zwei vorliegenden man auswählt. In der Abbildung ist die Präferenz in Pfeilrichtung dargestellt: nachfolgende Datenbanken sind prioritär zu verstehen. *D*, bzw. *X* sind wie zuvor die entsprechenden Abkürzungen für die beiden verwendeten Isotope. Des weiteren sind verwendete Quellen für die Daten im Text zu finden. Die finale Datenbank weist ≈ 71300 Reaktionen auf, in denen ≈ 1900 Spezies vertreten sind.

Betrachtungen von geringerer Bedeutung sind. Gemäß Albertsson et al. (2013) werden Spezies mit *OH*-Endgruppen nicht isotopisch modifiziert. Des weiteren wird auf eine isotopische Modifizierung von Reaktionen, die relativ langkettige Kohlenstoffverbindungen enthalten (d.h. die Anzahl von *C*-Atomen ist größer als 5) verzichtet (Albertsson et al., 2013). Im Gegensatz zu der Anwendung der Methode auf ein Isotop (Albertsson et al., 2013), ist bei der Anwendung der Methode auf zwei Isotope die Möglichkeit von doppelt-isotopischen Spezies gegeben, d.h. Spezies, in denen sowohl das Wasserstoff-Isotop als auch das Stickstoff-Isotop vertreten sind. In dieser Arbeit werden diese Isotope nicht verwendet. Der Grund liegt darin, dass ihre Entstehung aufgrund der notwendigen Einbindung beider Isotope unwahrscheinlich ist, und sie aus diesem Grunde vernachlässigbar sind. Falls in einer Reaktion rechtsstehende Ausgangsspezies unterschiedliche Produkte besitzen (wie in der Beispielreaktion 4.28) müssen die Reaktionskonstanten entsprechend der Multiplizität der Reaktion geändert werden. Konkret bedeutet dies, dass die entsprechenden kinetischen Konstanten der ersten beiden Reaktionen der isotopisch modifizierten Beispielreaktion 4.28 mit dem Faktor $\frac{1}{2}$ versehen werden müssen. Das geschieht,

4. DIE ENTWICKLUNG DER HÄUFIGKEITEN CHEMISCHER SPEZIES

weil die Grundidee der isotopischen Modifizierung darin besteht, dass die Kinetik der Reaktion durch die Ersetzung durch Isotope nicht oder nur schwach beeinflusst wird. Dieser Ansatz ist - wie in Albertsson et al. (2013) ausgeführt wird - vernünftig, wenn nicht für eine gegebene Reaktion doch experimentelle Daten vorliegen. Durch die Berücksichtigung von Daten aus verschiedenen Quellen der Literatur wird diesem Fakt bei der Konstruktion der finalen Datenbank aber Rechnung getragen.

Die praktische Durchführung beinhaltete erst die Konstruktion der durch isotopische Modifikation entstehenden Datenbank, die Deuterium-Isotope enthielt, sowie die anschließende Konstruktion der Datenbank, die die entsprechend modifizierten Reaktionen für das Stickstoff-Isotop enthielten. Die so entstandenen Datenbanken wurden in die Original-Datenbank eingebunden. Anschließend wurde die so entstandene Datenbank noch mit den bestehenden Daten zu Deuterium (Albertsson et al., 2013; Brown und Rice, 1986a,b; Flower et al., 2004; Hiraoka et al., 2005; Howe und Millar, 1993; Howe et al., 1994; Millar et al., 1989; Osamura et al., 2005; Roueff et al., 2007; Tielens, 1983; Walmsley et al., 2004; Willacy, 2007) bzw. dem Stickstoff-Isotop (Rodgers und Charnley, 2008a,b; Terzieva und Herbst, 2000) ergänzt. Wie bereits geschildert, wurden die kinetischen Daten der Originalreaktionen für die isotopisch modifizierten übernommen, mit Ausnahme der Oberflächenreaktionen, wie im nächsten Abschnitt dargelegt wird.

Oberflächenreaktionen nehmen eine besondere Rolle ein, da in ihnen die jeweiligen Energiebarrieren (vgl. Abschnitt 4.2) einen großen Einfluss haben. Aus denselben Gründen, die auch in Abschnitt 4.2 angeführt wurden, lassen sich die entsprechenden Parameter für die isotopisch modifizierten Spezies schwer ermitteln bzw. es existieren auch zu wenigen Isotopen Daten. Eine Möglichkeit wäre es, die vorliegenden Daten der Originaldatenbank (Semenov et al., 2010) für isotopisch modifizierte Spezies zu übernehmen, was die Gefahr beinhaltet, Desorptionsbarrieren zu unterschätzen (Kristensen et al., 2011). Eine zweite Möglichkeit wäre die generelle Tendenz einer mit der Masse der Spezies zunehmenden Energiebarriere (Aikawa et al., 1996), was aber eine unmittelbare Extrapolation wäre und ein Überschätzen sehr wahrscheinlich macht (siehe Tabelle 4.2). In dieser Arbeit wird ein Mittelweg zwischen beiden Ansätzen eingeschlagen und eine Extrapolation aufgrund vorliegender Daten zu atomarem Wasserstoff vorgenommen. Der Grund liegt darin, dass der relative Massenunterschied zwischen Deute-

Tabelle 4.2: Energiebarrieren der Spezies, auf denen die Extrapolation für beliebige Isotope beruht.

Spezies	$E_d[meV]$	$\frac{E_d}{E_{d,0}}$	$\frac{m}{m_0}$
H_2	71.9	1.0	1.0
HD	72.1	1.003	1.5
D_2	74.7	1.04	2.0

rium und atomarem Wasserstoff bedeutend größer ist, als der zwischen beiden vorliegenden Stickstoff-Isotopen, so dass eine entsprechend größere Abhängigkeit der Energiebarrieren er-

wartet werden kann. Die der Extrapolation zugrunde liegenden Daten (Kristensen et al., 2011) sind in Tabelle 4.2 wiedergegeben. Bezeichnet man mit S_I das Isotop und mit S_0 die unveränderte Spezies, so basiert die Extrapolation auf zwei linearen Interpolationen für den Bereich $\frac{m(S_I)}{m(S_0)} \leq 1.5$ bzw. $1.5 < \frac{m(S_I)}{m(S_0)} \leq 2$. Darin bezeichnet $m(S)$ die Masse der entsprechenden Spezies. Die Anwendung dieses Ansatzes hat - wie aus Tabelle 4.2 ersichtlich - nur geringfügig veränderte Energiebarrieren zur Folge, so dass das Resultat wie gewünscht eine vorsichtige Approximation darstellt. Die so errechnete finale Datenbank umfasst ≈ 17330 Reaktionen und ≈ 1900 Spezies. Die in diesem Abschnitt beschriebene Konstruktion dieser Datenbank ist in Abbildung 4.7 veranschaulicht.

4.6 Vergleich der simulierten Häufigkeiten mit Beobachtungen in Molekülwolken

Mithilfe des in diesem Abschnitt 4 vorgestellten chemischen Modells und in Verbindung mit dem im vorhergehenden Abschnitt 3 beschriebenen Modell für das Gas sowie den Staub lassen sich Simulationen für die Häufigkeiten von beobachtbaren chemischen Spezies in QSCC durchführen und mit Beobachtungen vergleichen. Diese umfangreiche Untersuchung wurde in Tornow et al. (2014b) für dieses Modell durchgeführt und wird deshalb nicht gesondert in dieser Arbeit betrachtet.

4. DIE ENTWICKLUNG DER HÄUFIGKEITEN CHEMISCHER SPEZIES

Teil III

Anwendung des Modells und Schlussfolgerungen

5

Anwendungen des Modells

5.1 Simulationsszenarien

Nachdem in den Kapiteln 3 bzw. 4 das Modell beschrieben worden ist, wird es in diesem Kapitel darum gehen, die in diesem Modell zur Verfügung stehenden Parameter geeignet festzulegen. Dabei kommt es darauf an, die verschiedenen möglichen Pfade, die der Vorläufer unseres heutigen Sonnensystems durchlaufen haben könnte, abzubilden. Ein komplexes Modell dieser Größenordnung verfügt über eine Vielzahl von Parametern. Es liegt auf der Hand, dass in dieser Arbeit nur eine kleine Auswahl der potentiell möglichen Simulationsszenarien zur Anwendung kommen kann. Da das chemische Modell von Semenov et al. (2010) übernommen worden ist (mit Ausnahme der isotopisch modifizierten Datenbank aus Kapitel 4.5) und die Anfangsbedingungen für die Konzentrationen der chemischen Spezies bereits in Kapitel 4.3 diskutiert wurden, liegen alle nun noch wählbaren Freiheitsgrade in der physikalischen Struktur der zu untersuchenden QSCC.

Die genaue physikalische Struktur des QSCC, aus dem heraus unser heutiges Sonnensystem entstanden sein könnte, ist weitgehend unklar (Bergin und Tafalla, 2007; Montmerle et al., 2006), und es ist somit a priori auch nicht klar, welchen QSCC man den Simulationen in dieser Arbeit zugrunde legen sollte. Da das vorliegende Modell keine Modellierung jenseits der quasi-stationären Phase erlaubt, kann auch kein Massenausfluss, wie er für eine spätere Phase (Bachiller, 1996; van Dishoeck und Blake, 1998) üblich ist, berücksichtigt werden. Für die Masse des QSCC wird deshalb eine Masse von $M \approx 1.01 \cdot M_{\odot}$ angenommen, was der minimal für unser Sonnensystem benötigten Masse entspricht (Desch, 2007). Trotz der Unkenntnis der physikalischen Struktur des QSCC bzw. seines einbettenden Riesenmolekülwolken-Komplexes gibt es dennoch zwei grundlegende Szenarien der Sternentstehung (Montmerle et al., 2006). Einmal das Szenario der mit massereichen Sternen und intensiver Strahlung einhergehenden Sternentstehung sowie jenes der mit masseärmeren und weniger turbulenten Gasbewegungen einhergehenden Sternentstehung. Wie in Kapitel 3 beschrieben, wird in dieser Arbeit von letzterem Szenario ausgegangen. Neben der oben definierten Masse des QSCC kann dann auch eine ungefähre Abschätzung des vorliegen Druckes am Rande des QSCC vorgenommen werden

5. ANWENDUNGEN DES MODELLS

Tabelle 5.1: Kennzahlen der QSCC, die in dieser Arbeit Verwendung finden

Bezeichnung des Kerns	Staubverteilung	$n_c [cm^{-3}]$	$R_c [pc]$	$A_V^{(ext)}$	G_0
Q_1	<i>MRN</i>	$1.14 \cdot 10^6$	$6.12 \cdot 10^{-2}$	3	1
Q_2	<i>MRN</i>	$1.48 \cdot 10^4$	$7.82 \cdot 10^{-2}$	3	1
Q_3	<i>MRN</i>	$1.43 \cdot 10^4$	$7.82 \cdot 10^{-2}$	3	2
Q_4	<i>MRN</i>	$3.91 \cdot 10^6$	$6.29 \cdot 10^{-2}$	3	2
Q_5	<i>BGS</i>	$1.79 \cdot 10^6$	$6.12 \cdot 10^{-2}$	3	1
Q_6	<i>BGS</i>	$1.48 \cdot 10^4$	$7.82 \cdot 10^{-2}$	3	1
Q_7	<i>BGS</i>	$1.48 \cdot 10^4$	$7.71 \cdot 10^{-2}$	3	2
Q_8	<i>BGS</i>	$7.23 \cdot 10^6$	$6.12 \cdot 10^{-2}$	3	2
Q_9	<i>MRN</i>	$4.31 \cdot 10^5$	$5.95 \cdot 10^{-2}$	10	1
Q_{10}	<i>MRN</i>	$1.86 \cdot 10^4$	$7.50 \cdot 10^{-2}$	10	1
Q_{11}	<i>MRN</i>	$7.98 \cdot 10^5$	$5.87 \cdot 10^{-2}$	10	2
Q_{12}	<i>MRN</i>	$1.80 \cdot 10^4$	$7.50 \cdot 10^{-2}$	10	2
Q_{13}	<i>BGS</i>	$2.65 \cdot 10^5$	$5.87 \cdot 10^{-2}$	10	1
Q_{14}	<i>BGS</i>	$3.02 \cdot 10^4$	$6.91 \cdot 10^{-2}$	10	1
Q_{15}	<i>BGS</i>	$7.01 \cdot 10^5$	$5.79 \cdot 10^{-2}$	10	2
Q_{16}	<i>BGS</i>	$1.98 \cdot 10^4$	$7.40 \cdot 10^{-2}$	10	2

(vgl. Kapitel 3.9). Eine gegebene Masse sowie ein gegebener externer Druck und eine vorgegebene externe Abschirmung sind nun hinreichend, um einen QSCC bzw. dessen Konfiguration zu definieren, wie in Kapitel 3.9 beschrieben worden ist. Aufgrund der mehrfach beschriebenen Unsicherheit ob des generellen Szenarios bezüglich der Entstehung des potentiellen Vorläufers unseres Sonnensystems wird dabei die Strahlenintensität variiert, wobei entweder die in diesem Modell übliche verwendete Intensität (Zucconi et al., 2001) oder aber das Doppelte davon verwendet wird. Das entspricht einem entsprechend variablen Strahlungsfeld in der Riesenmolekülwolke, in welchem der QSCC entstanden wäre. In gleichem Maße ist die Position des QSCC innerhalb der Riesenmolekülwolke unklar, weshalb die externe Abschirmung - definiert durch den Parameter $A_V^{(ext)}$ (vgl. Kapitel 3.7.4) - zwischen $A_V^{(ext)} = 3$ bzw. $A_V^{(ext)} = 10$ variiert wird. Dies entspräche einer Rand- bzw. eher zentraleren Position des QSCC innerhalb der Riesenmolekülwolke. Für jeden der in Tabelle 5.1 angegebenen QSCC wird die Veränderung der Häufigkeiten der chemischen Spezies mit *beiden* gegebenen C/O-Verhältnissen berechnet. Die gesamte Simulation besteht somit aus 32 Einzelsimulationen.

Tabelle 5.2: In dieser Arbeit untersuchte präbiotische Spezies

Spezies ^a	Quellen	relevante Isotope der Datenbank
CH_4	(Brack, 2005)	CH_3D
NH_3	(Brack, 2005)	NH_2D, XH_3
HCN	(Bada, 2004)	DCN, HCX
H_2CO	(Oró, 1995)	$HDCO$
H_2O	(Brack, 2005)	HDO
CO	(Brack, 2005)	-
H_2S	(Keefe et al., 1995; Oró, 1995)	HDS
HC_3N	(Balucani, 2009; Oró, 1995)	DC_3N, HC_3X
HC_5N	(Oró, 1995)	DC_5N, HC_5X
OCS	(Ferrante et al., 2008)	-
CO_2	(Brack, 2005)	-
SO_2	(Brack, 2005)	-
HNC	(Guillemín et al., 2004)	DNC, HXC
$HNCO$	(Guillemín et al., 2004)	$DNCO, HXCO$
C_2H_2	(Guillemín et al., 2004)	C_2HD
C_2H_6	(Guillemín et al., 2004)	C_2H_5D
C_2H_4	(Guillemín et al., 2004)	C_2H_3D
N_2	(Brack, 2005; Raulin et al., 2005)	NX
CH_4O ^b	(Brack, 2005)	CH_3DO ^b

Notes.

^(a) Die Zahl der potentiellen präbiotischen Spezies ist größer als die in der Tabelle vermerkten (siehe bspw. Balucani, 2009; Guillemín et al., 2004; Oró, 1995). Die in der Tabelle vermerkten Spezies entsprechen den in der zugrunde liegenden Datenbank vorhandenen Spezies mit relativ großer Bedeutung (Brack, 2005; Oró, 1995) und relativ geringer molekularer Masse.

^(b) In der zugrundeliegenden Datenbank (Semenov et al., 2010) ist für Methanol die Summenformel CH_4O anstelle der sonst üblicheren Halbstrukturformel CH_3OH verwendet worden.

5.2 Untersuchte Spezies

Die ersten Vorläufer der heutigen biologische Strukturen benötigten bereits komplexe Makromoleküle (Bada, 2004; Brack, 2005; Pascal et al., 2006; Raulin et al., 2005), die ihrerseits aus einfacheren Vorläufermolekülen heraus entstanden sind (siehe bspw. Guillemín et al., 2004; Oró, 1995). Diese einfachen Vorläufermoleküle bezeichnet man als präbiotische Moleküle bzw. präbiotische Spezies (Bada, 2004; Guillemín et al., 2004). Trotz der Komplexität der Synthese der biologischen Makromoleküle (Raulin et al., 2005), ist die Zahl der Moleküle, die eine präbiotische Biochemie zu initiieren vermögen, beschränkt (siehe bspw. Oró, 1995). Aus dieser Klasse an Molekülen wiederum sind für diese Arbeit einige der wichtigsten ausgewählt worden und in Tabelle 5.2 aufgelistet. Dabei sind einige Spezies wie bspw. C_2N_2 (Balucani, 2009) in der dieser Arbeit zugrunde liegenden Datenbank (Semenov et al., 2010) nicht enthalten und konnten so-

5. ANWENDUNGEN DES MODELLS

mit auch nicht untersucht werden. Für viele langkettige präbiotische Moleküle liegen wiederum weniger Daten vor (Le Teuff et al., 2000; Millar et al., 1997; Semenov et al., 2010; Smith et al., 2004; Wakelam et al., 2012; Woodall et al., 2007)-zudem würde eine Verwendung dieser Spezies eine enorme Vergrößerung der Datenbank zur Folge haben. Aufgrund dieser und der zuvor beschriebenen Schwierigkeiten ist die Liste der präbiotischen Spezies keinesfalls vollständig, enthält jedoch einen großen Teil der für die präbiotischen Chemie bedeutsamen Spezies (Balucani, 2009; Guillemin et al., 2004; Oró, 1995; Raulin et al., 2005).

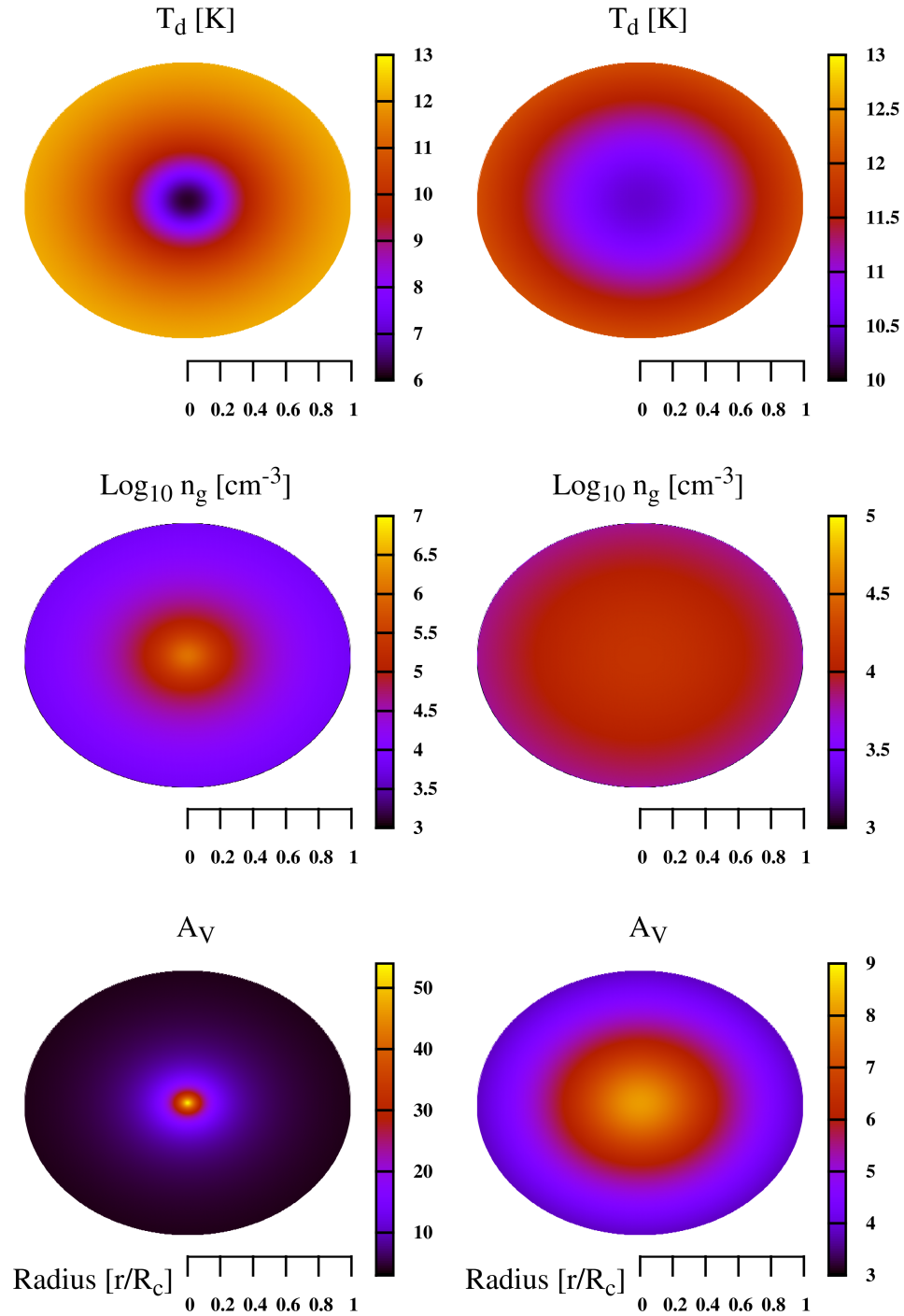


Abbildung 5.1: Typische QSCC, welche die geforderte Masse und den geforderten Randdruck besitzen und in dieser Arbeit verwendet werden - Gezeigt sind die zwei selbstkonsistenten QSCC, die die geforderte Masse und den geforderten Randdruck besitzen. Unabhängig von der gewählten Einbettung ($A_V^{(ext)}$) und der gewählten Intensität existieren zwei charakteristische Lösungen. Eine dieser Lösungen ist ein QSCC mit hoher zentraler Dichte und geringen Kerntemperaturen während die zweite Lösung ein Kern mit geringer zentraler Dichte und relativ hohen Kerntemperaturen ist. Die linke Spalte zeigt die Daten für den Kern Q_1 mit hoher zentraler Dichte während die rechte Spalte die Daten des Kernes Q_2 veranschaulicht.

5. ANWENDUNGEN DES MODELLS

6

Ergebnisse

6.1 Die quasi-stationäre Zeitentwicklung der Wolke

Wie in Kapitel 3.7.1 beschrieben wurde, fußt das in dieser Arbeit beschriebene Modell auf einer statischen Gaskonfiguration, die durch den Staub so schwach gestört ist, dass diese sich höchstens quasi-statisch ändert. Anhand der Daten eines Kerns, der den Berechnungen in dieser Arbeit zugrunde gelegt wurde, lässt sich zeigen, dass diese Annahme für die in dieser Arbeit verwendete Einbettung und Strahlungsintensität auch gerechtfertigt ist. Dazu ist in der folgenden ¹ Abbildung 6.1 die Veränderung einiger wesentlicher Parameter im zeitlichen Verlauf des QSCC Q8 (vgl. Tabelle 5.1) dargestellt. Unter Berücksichtigung der typischen Werte für diesen Typus eines QSCC (vgl. Abbildung 5.1), ist die Änderung aller Parameter relativ klein. Die Veränderung der Staubtemperatur beispielsweise ist an allen Punkten des Kerns geringer als 1 K. Typischerweise ist die Temperatur des Staubs am Ort r im QSCC aufgrund der Staubbewegung (vgl. Abschnitt 3.10) geringer als in der initialen Konfiguration. Dies liegt an der Zunahme der optischen Tiefe durch die höhere Staubdichte (vgl. ggf. Kapitel 3.6). Die geringe Zunahme der Staubtemperatur im Kernzentrum ist durch die in dieser Arbeit verwendete Annahme eines verschwindenden Staubflusses am Rande der Einhüllenden sowie durch die Abnahme der zentralen Staubdichte durch den geringen Gasfluss bedingt. Ein verschwindender Staubfluss am Rande der Einhüllenden bewirkt, dass die Staubdichte der Einhüllenden an ihrem Rand im Verlauf der zeitlichen Entwicklung stark verringert wird. Die optische Tiefe entlang eines rein *radial* gerichteten optischen Pfades kann dann durchaus abnehmen, womit die Temperatur des Staubs im Zentrum des QSCC wiederum leicht steigen kann. Für beliebige Orte im QSCC wird die optische Tiefe aber aufgrund der zunehmenden Staubdichte zunehmen, was in Abbildung 6.1 zu erkennen ist. Lediglich im Zentrum des QSCC lässt sich eine Erniedrigung der optischen Extinktion A_V um wenige (~ 2) Magnituden beobachten, was einer kleinen Änderung gegen-

¹Zu den Daten dieser Abbildung existieren integrierte Animationen, welche den zeitlichen Verlauf der Größen darstellen. Die zeitliche Veränderung der Gasdichte $\rho_g(r, t)/\rho_g(r, 0)$ sowie der Staubdichte $\rho_d(r, t)/\rho_d(r, 0)$ ist hier zu finden:

Die zeitliche Entwicklung der Veränderung der Staubtemperatur $T_d(r, t) - T_d(r, 0)$ sowie der optischen Extinktion $A_V(r, t) - A_V(r, 0)$ ist hier zu finden:

6. ERGEBNISSE

über der Ausgangskonfiguration ($A_V(r = 0, t = 0) \approx 90mag$) entspricht.

Auch die zeitliche Änderung der durch das veränderliche Temperaturprofil veränderlichen Gasdichte $\rho_g(r, t)$ ist an allen Orten des QSCC hinreichend klein. Zusammenfassend lässt sich im Hinblick auf alle relevanten Parameter des QSCC die quasi-statische Näherung a posteriori rechtfertigen.

6.2 Häufigkeiten der präbiotischen Moleküle

6.2.1 Allgemeine Beobachtungen

Alle in dieser Arbeit betrachteten präbiotischen Spezies zeigen eine Variabilität in ihren berechneten Konzentrationen. Dabei ist diese Variabilität von Spezies zu Spezies unterschiedlich, wie in Abbildung 6.2 zu erkennen ist. Eine relativ große Variabilität zeigen beispielsweise die hauptsächlich im Gas vorhandenen Spezies SO_2 , OCS und C_2H_2 . Unabhängig von den gewählten Bedingungen sind einige präbiotische Spezies stets in einer hohen Konzentration vorzufinden. Einerseits handelt es sich um die in allen simulierten QSCC am häufigsten vorhandenen Spezies Wasser, H_2O , sowie Methan, CH_4 , andererseits um Blausäure, HCN , Kohlenmonoxid, CO , und Ammoniak, NH_3 . Die Ergebnisse zeigen, dass der kollabierende Vorläufer des heutigen Sonnensystems an allen Orten in seinem Inneren eine relativ hohe Konzentration n_Y , wobei $n_Y = n_Y^{(Staub)} + n_Y^{(Gas)}$ bedeutet, an wichtigen präbiotischen Spezies mit relativen Konzentrationen $n_Y/n_H \gtrsim 10^{-9}$ besessen haben sollte.

Es bietet sich zur weiteren Analyse eine skalenfreie Betrachtung der Häufigkeiten präbiotischer Spezies an. Auf diese Weise wird ein unmittelbarer Vergleich der Bedeutung verschiedener Parameter des Modells möglich. Dies lässt sich am einfachsten mit einer nichtlinearen Transformation einer jeden Spezies bewerkstelligen. Dazu definiere ich mithilfe der Häufigkeit n_Y einer gegebenen Spezies einen Index I_Y . Um diesen Index zur numerischen Betrachtung besonders vorteilhaft verwenden zu können, sollte er normiert sein. Dies lässt sich mithilfe der bereits berechneten oberen $n_Y^{(u)}$ und unteren $n_Y^{(l)}$ Schranken für die Häufigkeit einer gegebenen Spezies n_Y (vgl. Abbildung 6.2) erreichen, indem wir die folgende Definition des Indexes I_Y anwenden:

$$I_Y(n_Y) = \frac{\log\left(\frac{n_Y}{n_Y^{(l)}}\right)}{\log\left(\frac{n_Y^{(u)}}{n_Y^{(l)}}\right)} \quad (6.1)$$

In dieser Gleichung bezeichnet $\log(x)$ wie üblich den natürlichen Logarithmus der Größe x , und es ist leicht ersichtlich, dass der Index in dieser Form normiert ist, d.h. $0 \leq I_Y \leq 1$. Aufgrund der zeitlichen und räumlichen Abhängigkeit der Konzentration einer gegebenen Spezies $n_Y(r, t)$, ist auch der Index zeitlich und räumlich variabel $I_Y(r, t)$. Um nun den Gehalt an präbiotischen Spezies der verschiedenen Kerne analysieren zu können, ist die Anwendung

eines räumlichen und zeitlichen Mittels erforderlich. Dazu definiere ich zunächst die mittlere Indexzahl an einem gegebenen Ort r zum Zeitpunkt t für einen Kern Q_i :

$$I_{\bar{Y}}(r, t) = \frac{1}{19} \cdot \sum_{Y \in PS} I_Y(r, t) \quad (6.2)$$

Dabei ist die Menge PS die Menge aller in dieser Arbeit betrachteten präbiotischen Spezies (vgl. Tabelle 5.2). Mithilfe der so aus den Gleichungen 6.1 bzw. 6.2 errechneten Größen lässt sich nun ein präbiotischer Index definieren, für den eine räumliche Mittelwertbildung erforderlich ist. Diese Mittelwertbildung erfordert die Berechnung eines relativen Volumens \hat{V}_i der i -ten Schale S_i (zur Definition der i -ten Schale im sphärischen Gitter siehe ggf. Kapitel 3.3 bzw. Abbildung 3.2) was wie folgt geschieht:

$$\hat{V}_i = \frac{V_i}{V_c} \quad (6.3)$$

Darin bezeichnet $V_c = \frac{4}{3}\pi R_c^3$ das Gesamtvolumen des gegebenen QSCC, für den die Berechnungen durchgeführt werden. Aufgrund der Normierung der relativen Volumina, d.h. $\sum_i \hat{V}_i = 1$, für alle QSCC lässt sich damit ein präbiotischer Index definieren, der es ermöglicht, alle in dieser Arbeit berechneten QSCC untereinander in ihrem Gehalt an präbiotischen Molekülen zu vergleichen. Dazu definiere ich den präbiotischen Index als Mittelwert über die radial vorliegenden mittleren Indizes aus Gleichung 6.2 in folgender Art und Weise:

$$\bar{I}_{\bar{Y}}(t) = \sum_i \hat{V}_i \cdot I_{\bar{Y}}(r_i, t) \quad (6.4)$$

Zur Vereinfachung der Notation wird im Folgenden für den präbiotischen Index die Abkürzung $P(t) = \bar{I}_{\bar{Y}}(t)$ verwendet werden. Die Definition des präbiotischen Index $P(t)$ in Gleichung 6.4 hat den Vorteil, dass sie in einem direkten Zusammenhang zum mittleren absoluten Gehalt an präbiotischen Molekülen steht, wie aus den Gleichungen 6.1, 6.2 ersichtlich ist. Für alle Kerne ist der Gehalt an präbiotischen Molekülen größer, wenn das C/O -Verhältnis 1.2 beträgt. Dieses naheliegende Ergebnis lässt sich mit dem höheren Gehalt an Kohlenstoff leicht erklären (vgl. Abschnitt 4.3). Dabei lässt sich zunächst in Abbildung 6.3 beobachten, dass die QSCC wie erwartet nicht ins thermodynamische Gleichgewicht gelangen (Herbst, 2001; Herbst et al., 2005; Herbst und Klemperer, 1973; Herbst und van Dishoeck, 2009; Herbst und Wakelam, 2007; Smith, 2008; van Dishoeck und Blake, 1998). Für ein gegebenes C/O -Verhältnis finden sich nun insgesamt vier verschiedene Klassen an QSCC, die sich relativ deutlich voneinander unterscheiden, wie in Abbildung 6.3 zu erkennen ist. Es handelt sich dabei einerseits um die QSCC, welche tiefer eingebettet sind, d.h. $A_V^{(ext)} = 10$, und um jene, die weniger stark eingebettet sind, d.h. $A_V^{(ext)} = 3$. Innerhalb dieser Gruppen wiederum haben die Kerne mit einer BGS-Staubgrößenverteilung einen signifikant geringeren präbiotischen Index im Vergleich zu jenen mit einer MRN-Verteilung. Außerdem lässt sich beobachten, dass auch die Intensität des Strahlungsfeldes (entsprechend dem Parameter G_0) einen signifikanten Einfluss auf den Gehalt

an präbiotischen Molekülen besitzt. Sind die QSCC gut abgeschirmt, so ist dieser Einfluss entsprechend verringert (vgl. rechtes Bild der Abbildung 6.3). Eine genauere Analyse zeigt, dass dieser Effekt hauptsächlich der tatsächlich höheren Strahlungsintensität zuzuschreiben ist. Ein Effekt der Staubanreicherung lässt sich nicht beobachten, wie aus der Abbildung ¹ 6.4 ersichtlich ist. Dies gilt auch dann, wenn der Staub sich innerhalb des QSCC ansammeln kann (vgl. Kapitel 6.1). In Bezug auf die Produktion von präbiotischen Spezies stehen zwei strahlungsgetriebene chemische Prozesse in Konkurrenz. Einerseits handelt es sich um die Radikalbildung mittels der Dissoziation von Wasserstoff bzw. der Ionisierung neutraler Moleküle. Diese Prozesse fördern die Bildung von präbiotischen Molekülen, da sie die Vorläufer bzw. Reaktanten für die entsprechenden Vorläuferreaktionen bilden. Andererseits führt die Dissoziation von präbiotischen Molekülen bzw. die Reaktionen der präbiotischen Moleküle mit Radikalen zu einer Abnahme der Konzentration der präbiotischen Moleküle. Je nach Spezies und Konfiguration des QSCC wird einer dieser beiden Effekte bedeutender sein und einen entsprechenden Einfluss auf die Konzentration der präbiotischen Spezies besitzen. Es zeigt sich, dass für die Mehrzahl der präbiotischen Spezies letzterer Effekt von größerer Bedeutung ist und eine Abnahme der Strahlungsintensität höhere Konzentrationen präbiotischer Moleküle fördert. Eine nähere mathematisch fundierte Analyse der verschiedenen Faktoren und ihrer Wirkung auf die Konzentration der präbiotischen Spezies ist Gegenstand des nächsten Abschnitts.

6.2.2 Variabilität einzelner Spezies

Es ist schwierig, die Konzentration der Spezies zu Beginn der Simulation eines QSCC anzugeben (vgl. Abschnitt 4.3). Dies gilt auch für das genaue D/H -Verhältnis, obwohl Einigkeit über die Größenordnung des Verhältnisses besteht (Lellouch et al., 2001; Linsky, 2003). Auf eine umfassende Variation der Anfangsbedingungen wurde in dieser Arbeit zugunsten einer Untersuchung der physikalischen Variabilität eines QSCC, aus dem sich unser Sonnensystem entwickelt haben könnte, verzichtet. Es ist jedoch bekannt, dass das C/O -Verhältnis auf die präbiotischen Spezies einen großen Einfluss haben kann (Kupper et al., 2012; Semenov et al., 2010; Wakelam et al., 2006). Ein vorgegebenes C/O -Verhältnis lässt sich natürlich durch praktisch beliebige Konfigurationen des C - bzw. O -Gehaltes erreichen. In dieser Arbeit wurde deshalb analog zu vorhergehenden Arbeiten (Kupper et al., 2012; Wakelam et al., 2006) nur eine der beiden Spezies variiert (vgl. ggf. Kapitel 4.3). Um nun den Einfluss der Änderung des C/O -Verhältnisses untersuchen zu können, greift man am besten auf den im vorhergehenden Abschnitt in Gleichung 6.1 für jede untersuchte Spezies definierten präbiotischen Index zurück. Im Gegensatz zur Untersuchung des vorhergehenden Abschnittes ist jetzt die Änderung einer gegebenen Spezies von Interesse, wenn das C/O -Verhältnis variiert wird. Natürlich wird dieses für jeden QSCC verschiedene Werte annehmen, so dass man auch in diesem Fall auf eine geeignete Mittelwertbildung zurückgreifen muss. Dazu definiere ich den nur zeitabhängigen radial

¹Die zeitliche und räumliche Abhängigkeit des mittleren Indexes $I_{\overline{\nu}}(r, t)$ für alle in dieser Arbeit betrachteten Fälle ist in entsprechenden Animationen dargestellt. Verwendet man als Abkürzung $BGS, 10$ für eine Simulation unter Verwendung der BGS -Staubgrößenverteilung bei einer Abschirmung von $A_V^{(ext)} = 10$, so sind dies die folgenden Animationen: $MRN, 3$, $MRN, 10$, $BGS, 3$, $BGS, 10$

Tabelle 6.1: Suszeptibilität aller Spezies bei 10 Myr

Chemische Spezies	$S_P^{(C/O)}(Y)^a$	$S_P^{(G_0)}(Y)^b$	$S_P^{(BGS/MRN)}(Y)^c$
CH_4	0.405	0.006	0.037
NH_3	-0.156	0.038	-0.026
HCN	0.268	0.049	0.029
H_2CO	0.147	0.186	-0.075
H_2O	-0.112	0.028	-0.002
CO	0.270	0.064	-0.147
H_2S	0.007	-0.016	≈ 0
HC_3N	0.127	0.205	-0.051
HC_5N	0.124	0.213	-0.056
OCS	0.111	0.068	-0.139
CO_2	0.108	0.218	-0.081
SO_2	0.099	0.076	-0.148
HNC	0.164	0.098	-0.086
$HNCO$	0.101	0.114	-0.049
C_2H_2	0.135	0.001	-0.297
C_2H_6	0.137	0.158	-0.013
C_2H_4	0.181	0.154	-0.097
N_2	0.157	0.020	-0.213
CH_4O^d	0.110	0.099	0.028

Notes.

^(a) Suzeptibilität aufgrund des veränderlichen C/O Verhältnisses. Dem Parametersatz P_1 entspricht das höhere C/O Verhältnis. Nähere Erläuterungen sind im Text zu finden.

^(b) Suzeptibilität aufgrund der veränderlichen Strahlungsintensität. Dem Parametersatz P_1 entspricht eine höhere Strahlungsintensität. Nähere Erläuterungen sind im Text zu finden.

^(c) Suzeptibilität aufgrund der veränderlichen Staubverteilung. Dem Parametersatz P_1 entspricht die BGS Staubgrößenverteilung. Nähere Erläuterungen sind im Text zu finden.

^(d) Auf Semenov et al. (2010) zurückgehende, verwendete Summenformel für Methanol (CH_3OH)

gemittelten Index einer gegebenen Spezies analog zu den Überlegungen des letzten Abschnittes 6.2.1 und Gleichung 6.4, wie folgt:

$$\bar{I}_Y(t) = \sum_i \hat{V}_i \cdot I_Y(r_i, t) \quad (6.5)$$

Mithilfe dieser Größe lässt sich nun aufgrund der grundlegenden Definition dieses Index (Gleichung 6.1) und seiner einhergehenden Normierung für beliebige Spezies und beliebige QSCC ein Maß für die Änderung der mittleren Konzentration einer Spezies bei einer vorgegebenen Parameteränderung untersuchen. Dabei sind im Rahmen dieser Untersuchung zwei Parameteränderungen von großem Interesse. Zum einen ist dies die Änderung der Konzentrationen der präbiotischen Spezies, wenn das C/O -Verhältnis variiert wird, zum anderen ist es der Ein-

6. ERGEBNISSE

fluss der Intensität des einfallenden Strahlungsfeldes. Für diese Untersuchungen führe ich nun zweckmäßig die Suszeptibilität $S_P(Y, t)$ einer Spezies Y für zwei voneinander verschiedene Sätze von Parametern $P_j, j = 1, 2$ wie folgt ein:

$$S_P^{(P_1, P_2)}(Y, t) = \frac{1}{N} \cdot \sum_{\forall Q_i} \left(\bar{I}_Y^{(P_1)}(t) - \bar{I}_Y^{(P_2)}(t) \right) \quad (6.6)$$

Dabei ist N gleich der Zahl aller für diese Untersuchung relevanten QSCC, nummeriert mit Q_i . $\bar{I}_Y^{(P_j)}(t)$ ist der gemäß Gleichung 6.5 für den Parametersatz P_j berechnete mittlere Index. In dieser Arbeit sind 6 Parametersätze untersucht worden. Diese Parametersätze entsprechen dem variablen C/O Verhältnis, der variablen Strahlungsintensität G_0 sowie der zugrunde liegenden Staubverteilung (siehe ggf. Tabelle 5.1). Für die Untersuchung der Suszeptibilität des C/O -Verhältnisses werden alle 16 QSCC zur Berechnung herangezogen. Das Ergebnis ist auf der rechten Seite der Abbildung 6.5 dargestellt. Die Suszeptibilität aufgrund des C/O -Verhältnisses schwankt dabei zwischen den Werten von ≈ 0.02 für Schwefelwasserstoff, H_2S , und der größten Suszeptibilität ≈ 0.5 für Methan, CH_4 . Die Suszeptibilität aller betrachteten Spezies zum Ende der Simulation sind in Tabelle 6.1 zu finden. Die zeitliche Variabilität der Suszeptibilität für das C/O -Verhältnis ist dabei für alle Spezies gering und typischerweise wird die Konzentration einer Spezies mit höherem C/O auch zunehmen, was sich mit dem höheren Gehalt an Kohlenstoff (vgl. ggf. Kapitel 4.3) erklären lässt. Die durch die Variabilität der Intensität der Strahlung hervorgerufenen Änderungen der präbiotischen Spezies lassen sich analog betrachten. Dazu wählt man diejenigen QSCC, die sich vorrangig durch die Intensität der einfallenden Strahlung unterscheiden. Die Parametermenge P_2 wird dann von den Kernen gebildet, die aufgrund ihrer Einbettung (wie bspw. Q_2 gegenüber Q_{10}) oder aber durch die Intensität des wirkenden Feldes (wie bspw. Q_2 gegenüber Q_3) eine höhere Strahlungsintensität aufweisen, während die Parametermenge P_1 von den Kernen mit entsprechend verringerter Intensität ist. Die Ergebnisse der Auswertung der Suszeptibilität für diesen Fall sind in Tabelle 6.1 zu finden und für einige Spezies in Abbildung 6.5 dargestellt. Mit Ausnahme einiger Spezies ist eine geringere Strahlungsintensität für eine höhere Konzentration einer der in dieser Abhandlung betrachteten präbiotischen Spezies (vgl. ggf. Tabelle 5.2) förderlich. Die Variation der in relativ hohen Konzentrationen vorhandenen Spezies Wasser (H_2O), Methan (CH_4) und Ammoniak (NH_3) ist dabei gering.

Den größten Einfluss auf die Konzentrationen der untersuchten präbiotischen Spezies besitzt allerdings die Staubgrößenverteilung, bei der sich große Unterschiede in der Produktion einiger präbiotischer Moleküle zeigen. Zu dieser Untersuchung wählt man natürlich diejenigen QSCC aus, die sich im Wesentlichen in den Staubgrößenverteilungen unterscheiden. Mit Ausnahme des Paares Q_4 und Q_8 (siehe Tabelle 5.1) bei denen der Dichteunterschied zu groß ist, sind alle anderen Paare für die Untersuchung gut geeignet. Dabei gehören zu der Parametermenge P_1 diejenigen QSCC, die eine BGS-Größenverteilung der Staubkörner aufweisen, während zur Parametermenge P_2 diejenigen QSCC mit einer MRN-Größenverteilung gehören. Aus den Ergebnissen, die in Abbildung 6.5 im zeitlichen Verlauf dargestellt sind, lässt sich ablesen, dass

einige der präbiotischen Spezies signifikant geringere Konzentrationen für den Fall aufweisen, dass die Berechnung mit einer BGS-Größenverteilung durchgeführt wurde. Neben der Bedeutung der katalytisch wirksamen Stauboberfläche für die Produktion chemischer Spezies, lässt sich in Abbildung 6.5 und Tabelle 6.1 aber auch ablesen, dass wie zuvor die Suszeptibilität für die Spezies Wasser (H_2O), Methan (CH_4) sowie Ammoniak (NH_3) gering ist.

6.2.3 Zusammensetzung des Eises

6.2.3.1 Eiszusammensetzung

Nach einer längeren stationären Phase wird ein QSCC letztlich kollabieren und einen Protostern formen (McKee und Ostriker, 2007; van Dishoeck und Blake, 1998). Das in ihm befindliche Eis wird dann bedeutend höheren Temperaturen ausgesetzt sein und in die Gasphase mindestens teilweise zurückkehren und verschiedene für das heiße Gas typische Reaktionen induzieren (Kupper et al., 2012; Tornow et al., 2014a). Demzufolge ist es von Bedeutung, welche Zusammensetzung die Eisphase in den untersuchten QSCC hat. Die Tabelle 6.3 zeigt die Variabilität der Eiszusammensetzung für alle untersuchten QSCC dieser Arbeit (vgl. ggf. Tabelle 5.1). Anhand der Tabelle 6.3 ist ersichtlich, dass die Spezies Wasser H_2O , Methan CH_4 , Kohlenmonoxid CO sowie Ammoniak NH_3 die Zusammensetzung des präbiotischen Anteils des Eises dominieren.

Aufgrund der Tatsache, dass präbiotische Spezies gegenüber niedermolekulareren Eisspezies tendenziell weniger flüchtig sind (Aikawa et al., 1996; Herbst und van Dishoeck, 2009), sollte der Anteil präbiotischer Eisspezies am Gesamtgehalt aller Eisspezies relativ hoch sein. Die Berechnung zeigt, dass dies für späte Zeiten zutreffend ist, mit Anteilen der präbiotischen Eisspezies in allen Kernen von weit über 50 Prozent. Dabei zeigen sich vergleichsweise große Unterschiede zwischen Kernen hoher Dichte und Kernen geringer Dichte wie in der Abbildung 6.6 zu erkennen ist. Dies gilt umso mehr für frühere Zeitpunkte wie man anhand der entsprechenden zeitlichen Verläufe des Anteils der präbiotischen Eisspezies erkennen kann¹. Dieses Resultat wird verständlich, wenn man berücksichtigt, dass das Ausfrieren einer gegebenen Spezies umso wahrscheinlicher ist je größer die Staubbichte ist. Zudem sind die Temperaturen in den Kernen mit höherer zentraler Dichte gegenüber jenen mit geringerer zentraler Dichte typischerweise geringer. Beide Effekte führen dazu, dass der Anteil des präbiotischen Eises gegenüber dem volatileren Eisspezies leicht verringert wird.

Der grundlegende Ablauf der zeitlichen Entwicklung eines QSCC ist für unterschiedliche Kerne ähnlich (McKee und Ostriker, 2007; van Dishoeck und Blake, 1998) und Messungen zeigen, dass dies auch für die chemische Zusammensetzung der Eisspezies gilt (Gibb et al., 2004; Mumma und Charnley, 2011; Öberg et al., 2011). Um einen Vergleich der simulierten Eiszusammensetzung mit diesen Beobachtungen (Gibb et al., 2004; Mumma und Charnley, 2011;

¹Der zeitliche Verlauf des Anteils der präbiotischen Eisspezies von Kernen mit relativ geringer zentraler Dichte ist hier zu finden: [Eine Animation für die QSCC mit hoher zentraler Dichte ist dagegen hier zu finden:](#)

6. ERGEBNISSE

Öberg et al., 2011) durchführen zu können sind die chemischen Häufigkeiten $n_Y(r, t)$ als solche nicht geeignet, da die beobachteten Größen Flächendichten $N_Y(\Gamma, t)$ (vgl. Abschnitt 4.2.3 bzw. Gleichung 4.14) der Spezies sind (Gibb et al., 2004; Öberg et al., 2011). Da reale QSCC eine geringere Symmetrie besitzen und zudem das Ziel eines Beobachtungsstrahls selbst bei einer hohen Auflösung schwer eingeschränkt werden kann (wie bspw. Pagani et al., 2004), ist es sinnvoll, nicht spezielle Pfade der berechneten QSCC herauszugreifen, sondern einen geeigneten Mittelwert für die berechneten Flächendichten zu definieren. Betrachtet man den Kern als sphärisches Objekt am Himmel mit Radius R , so lässt sich eine mittlere Flächendichte als Mittelwert aller Flächendichten über den QSCC als sphärisches Objekt definieren. Diese mittlere Flächendichte $\bar{N}_Y(t)$ einer chemischen Spezies berechnet sich aus den radial vorliegenden Flächendichten $N_Y(r, t)$ wie folgt:

$$\bar{N}_Y(t) = \frac{\int_0^R \int_0^{2\pi} N_Y(r, t) r dr d\phi}{\int_0^R \int_0^{2\pi} r dr d\phi} = \frac{1}{R^2} \cdot \int_0^R N_Y(r, t) r dr \quad (6.7)$$

Dabei wurde berücksichtigt, dass aufgrund der vorliegenden sphärischen Symmetrie ein Beobachter stets radiale Pfade und einhergehende Flächendichten beobachtet. Zur approximativen Berechnung des Integrales aus Gleichung 6.7 wurde dabei auf die Rechteckregel unter Berücksichtigung der für jede Schale im Kern berechneten Häufigkeiten $n_Y(r_i, t)$ zurückgegriffen.

Die Auswertung aller Berechneten QSCC zeigt typische Häufigkeiten der wichtigsten präbiotischen Eisspezies wie sie in Tabelle 6.2 für Zeiten $t \geq 2$ Myrs wiedergegeben sind. Die Abbildung 6.7 zeigt die Bandbreite der simulierten Häufigkeiten der häufigsten präbiotischen Spezies. Die relativen Anteile dieser Eisspezies sind in Abbildung 6.8 für alle simulierten QSCC dargestellt. Aus beiden Darstellungen kann man erkennen, dass Ammoniak NH_3 sowie H_2S eine geringe Variabilität innerhalb der für diese Arbeiten berechneten QSCC aufweisen, während die Kohlenstoff-haltigen Spezies CH_4 sowie CO eine größere Variabilität besitzen. Im Falle von Methan CH_4 ist diese Variabilität nahezu ausschließlich durch das in einigen Simulationen erhöhte C/O -Verhältnis zu erklären, während CO eine größere Empfindlichkeit gegenüber physikalisch variablen Parametern der QSCC besitzt. Dabei weist CO in allen Simulationen mit einem hohen C/O -Gehalt einen mit den Beobachtungen verträglichen Anteil auf. Der Gehalt an CO_2 ist in allen Simulationen gegenüber den beobachteten Werten (siehe Tabelle 6.2) stark verringert. Auch der Gehalt an Methanol (CH_4O) ist gegenüber den aus Beobachtungen gewonnenen Daten deutlich verringert. Aktuelle Modelle für die Entwicklung der Häufigkeiten chemischer Spezies implizieren CH_4 , CO , NH_3 und natürlich Wasser H_2O als dominierende Eiskomponenten (Aikawa et al., 2012; Furuya et al., 2012; Garrod und Herbst, 2006; Garrod et al., 2008; Hincelin et al., 2013; Tornow et al., 2014b). Auch der gegenüber den Beobachtungen (Gibb et al., 2004; Mumma und Charnley, 2011; Öberg et al., 2011) geringe Anteil von CO_2 -Eis entspricht dem gegenwärtigen Stand der astrochemischen Modelle (Aikawa et al., 2012; Furuya et al., 2012; Hincelin et al., 2013), wobei betont werden muss, dass die relativ hohe Variabilität von CO_2 (Tabelle 6.1), Abbildung 6.2) eine große Abhängigkeit vom Modellszenario bedeuten. Zudem zeigt die Konzentration von CO_2 unter den gegebenen che-

Tabelle 6.2: Häufigkeiten der wichtigsten präbiotischen Eisspezies für $t \geq 2$ Myrs

Spezies Y	Berechnete Häufigkeit $\overline{N}_Y(t)/\overline{N}_{H_2O}(t)^{a,b}$ in %	Beobachtete Häufigkeiten ^c
CH_4	35 – 121	< 3 – 7
NH_3	11 – 15	4 – 9
CO	0.3 – 65	9 – 61
CO_2	1(–9) – 2(–2)	7 – 35
H_2S	5(–2) – 8(–2)	< 1 – 4
CH_4O ^d	2(–13) – 0.1	5 – 12

Notes.

(^a) Zur Definition von $\overline{N}_Y(t)$ siehe Gleichung 6.7.

(^b) Die Notation $a(b)$ ist als abkürzende Schreibweise für $a \cdot 10^b$ verwendet worden.

(^c) Die Daten für die beobachteten Häufigkeiten sind Mumma und Charnley (2011), Gibb et al. (2004) sowie Öberg et al. (2011) entnommen.

(^d) Auf Semenov et al. (2010) zurückgehende, verwendete Summenformel für Methanol(CH_3OH)

mischen Anfangsbedingungen (siehe Abschnitt 4.3) eine hohe zeitliche Abhängigkeit und somit infolge der auftretenden Nicht-Gleichgewichtsschemie (siehe Abschnitt 6.2 und Abbildung 6.3) eine hohe Abhängigkeit von der Lebensdauer eines QSCC. Die von den Beobachtungen (Gibb et al., 2004; Mumma und Charnley, 2011; Öberg et al., 2011) abweichende Konzentration von Methanol (CH_4O) ist in ähnlichen Rechnungen bereits dargelegt worden (Aikawa et al., 2012; Furuya et al., 2012; Hincelin et al., 2013), obgleich die in dieser Arbeit berechneten Werte größere Abweichungen zeigen. Auch dies ist teilweise der großen Variabilität des Methanols geschuldet (siehe Abb. 6.2). Das macht aber auch deutlich, dass nach gegenwärtigem Stand der astrochemischen Modelle (Aikawa et al., 2012; Furuya et al., 2012; Hincelin et al., 2013; Semenov et al., 2010) die beobachteten Häufigkeiten des Methanols schwer zu erklären sind. Es lässt sich aber festhalten, dass die berechneten Häufigkeiten von NH_3 und CO relativ gut mit den beobachteten Werten übereinstimmen, wie aus der Abbildung 6.7 bzw. aus der Tabelle 6.2 ersichtlich ist.

6.2.3.2 Vergleich der Eiszusammensetzung mit kometarem Eis

Neben der Konzentration an präbiotischen Spezies ist auch die Zusammensetzung des Eises auf den Staubkörnern in den untersuchten QSCC von großem Interesse. Da nach momentanem Stand der Forschung Kometen seit dem Zeitpunkt ihrer Entstehung relativ geringe Änderungen ihrer Zusammensetzung erfahren haben (Despois und Cottin, 2005; Mumma und Charnley, 2011), könnte der Vergleich zwischen ihrer Zusammensetzung und der Zusammensetzung des Eises in den simulierten QSCC weitere Indizien für die Entstehungsgeschichte des solaren Nebels liefern.

In dieser Arbeit wird deshalb eine Analyse der relativen Eiszusammensetzung auf den Staubkörnern analog zu Mumma und Charnley (2011) erfolgen. Dazu berechnet man für jede prä-

6. ERGEBNISSE

biotische Spezies ihren relativen Wert in Bezug auf die Konzentration von Wassereis auf dem Staubkorn. Die derart berechneten Werte lassen sich dann mit den Werten von Mumma und Charnley (2011) und Despois und Cottin (2005) vergleichen. Zunächst berechne ich die Variation der relativen Eiszusammensetzung auf den Staubkörnern im QSCC. Die Vorgehensweise ist dabei vollkommen analog zu der Berechnung in Abschnitt 6.2.1 (vgl. ggf. Abbildung 6.2). Die berechneten Werte bzw. der Wertebereich sind in Tabelle 6.3 angegeben. Mithilfe der in der Literatur vorzufindenden beobachteten Werte auf Kometen lassen sich nun die entsprechenden Zonen in den QSCC identifizieren, in denen die Eiszusammensetzung des Staubs mit der Zusammensetzung der Kometen gut übereinstimmt. Dabei gilt es zu beachten, dass nicht für alle Spezies Beobachtungsdaten vorliegen, bzw. dass wenn sie vorliegen, diese nicht unbedingt repräsentativ für die Zusammensetzung des Eises sein müssen (vgl. Tabelle 6.3). Für das Eis im QSCC lässt sich leicht mithilfe der Spezies, für die Beobachtungsdaten vorliegen, ein Index definieren, der die Übereinstimmung zwischen der Eiszusammensetzung im QSCC und den Beobachtungsdaten zeigt. Mithilfe der Bandbreite an beobachteten Häufigkeiten auf Kometen, mit maximalen Werten $n_Y^{(max)}$ und minimalen Werten $n_Y^{(min)}$ aus der Literatur (Despois und Cottin, 2005; Mumma und Charnley, 2011), lässt sich der Index wie folgt definieren:

$$I_{Ice}(r, t) = \frac{100}{N} \cdot \sum_{\forall Y} F_I \left(n_Y(r, t), n_Y^{(min)}, n_Y^{(max)} \right) \quad (6.8)$$

Dabei entspricht N der Zahl der Spezies, für die Daten vorliegen (vgl. Tabelle 6.3). $F_I(x, x_1, x_2)$ ist die Indikator-Funktion für den Wert x , d.h.:

$$F_I(x, x_1, x_2) = \begin{cases} 1 & : x_1 \leq x \leq x_2 \\ 0 & : sonst \end{cases} \quad (6.9)$$

Ein Wert von 100 der Indexfunktion $I_{Ice}(r, t)$ an einem gegebenen Punkt r zu einer gegebenen Zeit t würde bedeuten, dass die Häufigkeit aller Eisspezies mit der Bandbreite der beobachteten entsprechenden Werten verträglich ist. Berechnet man nun den mithilfe der Gleichung 6.8 definierten Eis-Index für alle QSCC so beobachtet man, dass ein höheres C/O -Verhältnis zu höheren Indexwerten führt. Der Einfluss der Staubverteilung ist dabei als gering einzuschätzen. Tiefer eingebettete QSCC weisen ferner höhere Indexwerte auf als weniger tief eingebettete. Aufgrund der geringen Zahl der Spezies, die berücksichtigt werden konnten, erlaubt der berechnete Eis-Index keine weitreichenden Schlüsse. Es lässt sich aber dennoch beobachten, dass die Eiszusammensetzung mit der beobachteten Zusammensetzung der Kometen tendenziell im zentralen Bereich des QSCC und im Bereich des Randes des QSCC am meisten übereinstimmt. Dies wird ersichtlich, wenn man die berechneten Werte des Eis-Index für alle QSCC mit tiefer bzw. geringer Einbettung aufsummiert und entsprechend normiert. Dieses Resultat ist in Abbildung ¹ 6.9 zu sehen.

¹Zu den Daten dieser Abbildung existieren integrierte Animationen, welche den zeitlichen Verlauf darstellen. Die zeitliche Veränderung des Indexes für $Av^{(ext)} = 3$ ist hier zu finden: Eine Animation für die QSCC mit $Av^{(ext)} = 10$ ist hier zu finden:

Tabelle 6.3: Variabilität der Eiszusammensetzung aller QSCC für alle radialen Positionen und für $t \geq 2$ Myr, angegeben in Prozent bezogen auf Wassereis.

Chemische Spezies	rel. Konzentration $n_Y^{(s)}/n_{H_2O}^{(s)}$ in % ^a	Beobachtungsdaten ^b
CH_4	2.199(1) - 1.949(2)	✓
NH_3	4.160(0) - 2.150(1)	✓
HCN	0.159(-2) - 1.206(2)	✓
H_2CO	0.429(-9) - 0.632(0)	-
H_2O	100	-
CO	0.112(0) - 9.676(2)	-
H_2S	0.331(-1) - 0.529(0)	✓
HC_3N	0.370(-14) - 0.595(-1)	-
HC_5N	0.220(-19) - 0.140(-2)	-
OCS	0.158(-22) - 0.797(-5)	-
CO_2	0.378(-12) - 0.218(-1)	✓
SO_2	0.463(-32) - 0.112(-4)	-
HNC	0.607(-8) - 0.259(0)	-
$HNCO$	0.579(-15) - 0.571(-1)	✓
C_2H_2	0.831(-8) - 0.139(-1)	✓
C_2H_6	0.258(-16) - 0.121(-3)	✓
C_2H_4	0.760(-7) - 0.511(-1)	-
N_2	0.119(-2) - 4.720(0)	-
CH_4O ^c	0.768(-15) - 0.399(0)	✓

Notes.

^(a) Die Notation $a(b)$ ist als abkürzende Schreibweise für $a \cdot 10^b$ verwendet worden.

^(b) Beobachtungsdaten liegen vor, wenn mehr als eine Beobachtung für die betreffende Spezies in der Literatur (Despois und Cottin, 2005; Mumma und Charnley, 2011) gefunden werden konnte. Außerdem müssen die betreffenden Beobachtungen repräsentativ oder näherungsweise repräsentativ für die Konzentrationen auf den Kometenoberflächen sein, weshalb einige Spezies nicht berücksichtigt werden konnten (vgl. ggf. Despois und Cottin, 2005).

^(c) Auf Semenov et al. (2010) zurückgehende, verwendete Summenformel für Methanol(CH_3OH)

6.2.4 Isotopenverhältnisse der präbiotischen Spezies

Isotopenverhältnisse sind abhängig von den physikalisch-chemischen Randbedingungen der Entstehung eines QSCC, wie in diesem Kapitel ersichtlich wird. Sie bieten durch diese Abhängigkeit die Möglichkeit, Einblicke in die Entstehungsgeschichte unseres Sonnensystems zu bekommen (Mumma und Charnley, 2011; van Dishoeck und Blake, 1998). Aufgrund der vorhandenen Daten (vgl. Kapitel 4.5) lassen sich die Isotopenverhältnisse von N/X und D/H gegenwärtig am besten simulieren. Um eine Übersicht über die Isotopenverhältnisse und ihre Abhängigkeiten zu bekommen, ist es zunächst vorteilhaft, die Bandbreite an beobachteten Isotopenverhältnissen für die einzelnen präbiotischen Spezies, für die sich ein solches Verhältnis bilden lässt, zu berechnen. Mithilfe der berechneten Bandbreiten des Isotopenverhältnisses für jede Spezies kann - mithilfe der Überlegungen aus Abschnitt 6.2.2 - ein Index für die Isotopenverhältnisse erstellt werden. Dieser ermöglicht es, die Suszeptibilität (vgl. ggf. Gleichung 6.6) für jedes Isotopenverhältnis jeder präbiotischen Spezies zu berechnen. Die Ergebnisse dieser Berechnung sind in Tabelle 6.4 für die Stickstoff-Isotopenverhältnisse X/N einzelner präbiotischer Spezies dargestellt, während in Tabelle 6.5 die entsprechenden Werte für das D/H -Verhältnis zu finden sind. Die Suszeptibilität aller präbiotischen Spezies ist dabei mit Ausnahme einiger Spezies ($NH_3, HNC O, N_2, HC_3 N, C_2 H_2, C_2 H_4$) für alle betrachteten Parameter ($C/O, G_0, BGS/MRN$) sehr klein. Die Variabilität der Isotopenverhältnisse ist damit vorrangig den lokal im gegebenen QSCC vorliegenden variablen physikalischen Bedingungen wie Temperatur- ($T_g(r), T_d(r)$) und Strahlungsfeld ($A_V(r)$) zuzuschreiben. Mit dem einsetzenden Kollaps des QSCC finden zahlreiche Transport- sowie chemische Prozesse statt (McKee und Ostriker, 2007; van Dishoeck und Blake, 1998), die die vorliegenden Häufigkeiten der präbiotischen Moleküle verändern. Diese Prozesse sind von der Position innerhalb des kollabierenden Kerns abhängig (Herbst und van Dishoeck, 2009; van Dishoeck und Blake, 1998). Mit der sich dann ausbildenden Scheibe werden schließlich die Planeten aus Planetesimalen gebildet, deren Vorläufer die Staubkörner im QSCC sind (Blum und Wurm, 2008; Montmerle et al., 2006; Walsh und Morbidelli, 2011). Es ist demzufolge interessant, inwiefern die Isotopenverhältnisse innerhalb der simulierten QSCC mit den für die Erde und den Kometen beobachteten Isotopenverhältnissen übereinstimmen. Bei dem Vergleich der Isotopenverhältnisse innerhalb des QSCC mit den in Kometen ermittelten Werten (Hartogh et al., 2011; Mumma und Charnley, 2011) wird dabei wie folgt vorgegangen. Man definiert für jeden Zeitpunkt und jeden radialen Punkt innerhalb des Kerns eine Indexzahl $I_{D/H}$ bzw. $I_{N/X}$ wie folgt:

$$\begin{aligned}
 I_{D/H}(r, t) &= 50 \cdot \sum_{i=1}^2 F_I(I_i(r, t), I_i^{(max)}, I_i^{(min)}) \\
 I_{N/X}(r, t) &= 50 \cdot \sum_{i=3}^4 F_I(I_i(r, t), I_i^{(max)}, I_i^{(min)})
 \end{aligned} \tag{6.10}$$

Darin bezeichnen $I_i, i = 1, 4$ die entsprechenden Isotopenverhältnisse, wobei $I_1 = HDO/H_2O$, $I_2 = DCN/HCN$, $I_3 = HCN/HCX$ und $I_4 = NH_3/XH_3$ gesetzt wurde. Des Weiteren be-

Tabelle 6.4: Variabilität des X/N -Isotopenverhältnisses aller QSCC für alle radialen Positionen und für $t \geq 2$ Myr sowie Suszeptibilität aller Spezies bei 10 Myr

Isotopenverhältnis ^{a,b}	Wertebereich ^{c,d}	$S_Y^{(C/O)}$	$S_Y^{(G_0)}$	$S_Y^{(BGS/MRN)}$ ^e
XH_3/NH_3	6.080(−4)- 6.320(−3)	0.012	0.024	−0.116
$H CX/H CN$	3.000(−4)- 4.562(−3)	0.033	0.049	−0.040
HC_3X/HC_3N	7.774(−4)- 5.497(−3)	0.022	0.069	−0.055
HXC/HNC	3.329(−4)- 4.919(−3)	0.030	0.045	−0.051
$HXCO/HNCO$	3.618(−4)- 7.769(−3)	−0.035	−0.122	−0.142
NX/N_2	1.518(−3)- 6.992(−3)	0.014	0.052	−0.148
gXH_3/gNH_3	2.464(−3)- 2.745(−3)	−0.074	0.034	0.179
$gHCX/gHCN$	9.719(−4)- 3.854(−3)	−0.039	0.017	−0.037
gHC_3X/gHC_3N	2.361(−3)- 5.371(−3)	−0.163	0.178	−0.107
gHC_5X/gHC_5N	1.709(−3)- 4.194(−3)	−0.013	−0.059	−0.015
$gHXC/gHNC$	3.456(−4)- 4.329(−3)	−0.002	0.054	0.009
$gHXCO/gHNCO$	3.677(−4)- 7.898(−3)	−0.035	−0.122	−0.141
gNX/gN_2	1.530(−3)- 6.838(−3)	0.014	0.052	−0.151

Notes.

- (^a) Aufgrund zu geringer numerischer Werte konnte das Isotopenverhältnis HC_5X/HC_5N für die Analyse nicht berücksichtigt werden.
- (^b) Oberflächenspezies sind mit dem Buchstaben g gekennzeichnet.
- (^c) Die simulierten Werte müssen durch die Zahl der möglichen Konfigurationen geteilt werden, falls das Stickstoff-Isotop X an verschiedenen Stellen in der Molekülstruktur vorhanden sein kann (vgl. ggf. Mumma und Charnley, 2011).
- (^d) In der Tabelle wird abkürzend die Notation $a(b)$ für den Ausdruck $a \cdot 10^b$ verwendet.
- (^e) Die Analyse der Suszeptibilitäten geschieht analog zu den Betrachtungen des Abschnittes 6.2.2 und die Bedeutung aller Abkürzungen wurde übernommen.

6. ERGEBNISSE

Tabelle 6.5: Variabilität des D/H -Isotopenverhältnisses aller QSCC für alle radialen Positionen und für $t \geq 2$ Myr sowie Suszeptibilität aller Spezies bei 10 Myr

Isotopenverhältnis ^{a,b}	Wertebereich ^{c,d}	$S_Y^{(C/O)}$	$S_Y^{(G_0)}$	$S_Y^{(BGS/MRN)}$ ^e
CH_3D/CH_4	8.572(−4)- 3.195(−2)	−0.025	0.033	0.032
NH_2D/NH_3	0.232(−4)- 9.605(−2)	0.058	0.072	−0.088
DCN/HCN	5.501(−4)- 5.144(−1)	0.055	0.074	−0.084
$HDCO/H_2CO$	1.291(−3)- 1.135(−1)	0.038	0.070	−0.083
HDO/H_2O	1.025(−4)- 1.089(−1)	0.062	0.075	−0.099
HDS/H_2S	1.995(−4)- 2.284(−1)	−0.010	0.039	−0.067
DC_3N/HC_3N	2.116(−3)- 3.916(−1)	0.053	0.081	−0.127
DNC/HNC	2.720(−4)- 6.093(−1)	0.038	0.060	−0.067
$DNCO/HNCO$	0.712(−4)- 3.870(−1)	−0.023	0.063	0.030
C_2HD/C_2H_2	2.398(−3)- 1.051(−1)	0.012	0.058	−0.151
C_2H_3D/C_2H_4	9.373(−4)- 2.776(−2)	−0.022	0.043	−0.069
CH_3DO/CH_4O ^f	7.230(−5)- 6.583(−2)	−0.041	0.115	0.004
gCH_3D/gCH_4	8.714(−4)- 3.184(−2)	−0.028	0.032	0.035
gNH_2D/gNH_3	3.488(−4)- 2.727(−2)	−0.032	0.053	0.036
$gDCN/gHCN$	8.638(−4)- 4.343(−2)	−0.036	0.028	0.031
$gHDCO/gH_2CO$	1.285(−3)- 1.940(−1)	−0.000	0.132	0.048
$gHDO/gH_2O$	3.967(−4)- 1.780(−2)	−0.038	0.032	0.054
$gHDS/gH_2S$	6.067(−4)- 3.560(−2)	−0.036	0.027	0.033
gDC_3N/gHC_3N	1.048(−3)- 2.241(−1)	0.013	0.144	0.036
gDC_5N/gHC_5N	8.531(−4)- 1.074(−1)	0.087	0.081	0.061
$gDNC/gHNC$	5.213(−4)- 7.196(−1)	0.004	0.118	0.042
$gDNCO/gHNCO$	0.724(−4)- 3.936(−1)	−0.023	0.063	0.030
gC_2HD/gC_2H_2	1.192(−3)- 3.736(−2)	−0.029	0.035	0.042
gC_2H_5D/gC_2H_6	8.449(−4)- 1.102(−1)	−0.018	0.096	0.080
gC_2H_3D/gC_2H_4	4.027(−3)- 1.705(−1)	−0.011	0.046	0.130
gCH_3DO/gCH_4O ^f	2.350(−5)- 3.233(−2)	−0.017	−0.002	0.055

Notes.

(a) Aufgrund zu geringer numerischer Werte konnten die Isotopenverhältnisse DC_5N/HC_5N bzw. C_2H_5D/C_2H_6 für die Analyse nicht berücksichtigt werden.

(b) Oberflächenspezies sind mit dem Buchstaben g gekennzeichnet.

(c) Die simulierten Werte müssen durch die Zahl der möglichen Konfigurationen geteilt werden, falls Deuterium D an verschiedenen Stellen in der Molekülstruktur vorhanden sein kann (vgl. ggf. Mumma und Charnley, 2011).

(d) In der Tabelle wird abkürzend die Notation $a(b)$ für den Ausdruck $a \cdot 10^b$ verwendet.

(e) Die Analyse der Suszeptibilitäten geschieht analog zu den Betrachtungen des Abschnittes 6.2.2, und die Bedeutung aller Abkürzungen wurde übernommen.

(f) Auf Semenov et al. (2010) zurückgehende, verwendete Summenformel für Methanol(CH_3OH)

zeichnet $F_I(x, x_1, x_2)$ die Indikatorfunktion (vgl. ggf. Gleichung 6.9) mit den entsprechenden Minimal- und Maximalwerten für die beobachteten Isotopenverhältnisse. Diese Werte wurden für die ersten 3 Isotopenverhältnisse der Tabelle 2 von Mumma und Charnley (2011) bzw. von Hartogh et al. (2011) übernommen während die Werte für das Isotopenverhältnis I_4 Rousselot et al. (2014) und Shinnaka et al. (2014) entnommen wurden. Dabei wird in allen Fällen das Intervall gewählt, welches mit allen beobachteten Verhältnissen verträglich ist. Es zeigt sich, dass es nur in weniger tief eingebetteten QSCC mit den beobachteten Isotopenverhältnissen relevante Übereinstimmungen gibt. In diesen QSCC wiederum zeigt sich, dass die Übereinstimmung des D/H -Verhältnisses mit den beobachteten Werten zum Rand des QSCC hin größer wird. Dennoch ist die Übereinstimmung mit den beobachteten D/H -Verhältnissen gering wie Abbildung 6.10 veranschaulicht. Diese Abbildung ist durch Summation und anschließende Mittelwertbildung der Resultate in einzelnen gegebenen QSCC entstanden. Aus der Abbildung ¹ 6.10 ist weiter ersichtlich dass die Übereinstimmung im Falle einer höheren Strahlungsintensität $G_0 = 2$ (vgl. ggf. Tabelle 5.1) größer ist, während es im Falle einer geringeren Strahlungsintensität von $G_0 = 1$ eine wesentlich geringere Übereinstimmung mit den beobachteten Isotopenverhältnissen gibt. Aufgrund des einsetzenden Kollapses (McKee und Ostriker, 2007; Natta, 2000; van Dishoeck und Blake, 1998) werden radial unterschiedliche Transportprozesse eintreten. Je nach Lage innerhalb des kollabierenden QSCC ist es dabei denkbar, dass das Material nur geringfügig transformiert wird (Dodson-Robinson et al., 2009; Ilgner et al., 2004; Ilgner und Nelson, 2008; Visser et al., 2011, 2009), so dass einige der Staubkörner in den äußeren Zonen des QSCC das Ausgangsmaterial für Kometen gebildet haben könnten. Im Gegensatz zum D/H -Verhältnis, zeigt sich im Falle des N/X -Verhältnisses nur im Falle des QSCC Q_8 (vgl. Tabelle 5.1) in einem radialen Bereich $r \approx 0.3 \cdot R_c$ eine Übereinstimmung des Isotopenverhältnisses mit den beobachteten Werten ². Wie zuvor ist diese Übereinstimmung besser, falls ein hohes C/O -Verhältnis von 1.2 (vgl. ggf. Kapitel 4.3) statt eines C/O -Verhältnisses von 0.4 für die Simulation verwendet worden ist. Betrachtet man beide Isotopenverhältnisse, so erscheint es wahrscheinlich, dass das Ausgangsmaterial für die Kometen aus einer späteren Phase - in welcher die Staubkörner des QSCC weiteren Transformationen unterliegen - stammen sollte.

¹Zu den Daten dieser Abbildung existieren integrierte Animationen, welche den zeitlichen Verlauf darstellen. Die zeitliche Veränderung des Isotopen-Indexes $I_{D/H}$ für $G_0 = 2$ (vgl. ggf. Tabelle 5.1) ist hier zu finden: [\[Link\]](#), die für die QSCC mit $G_0 = 1$ ist hier zu finden: [\[Link\]](#)

²Die integrierten Animationen zeigen, dass die besten Übereinstimmungen zudem zu frühen Zeitpunkten zu finden sind. Der zeitliche Verlauf des Indexes $I_{N/X}$ für $G_0 = 2$ ist hier zu finden: [\[Link\]](#), die für die QSCC mit $G_0 = 1$ ist hier zu finden: [\[Link\]](#)

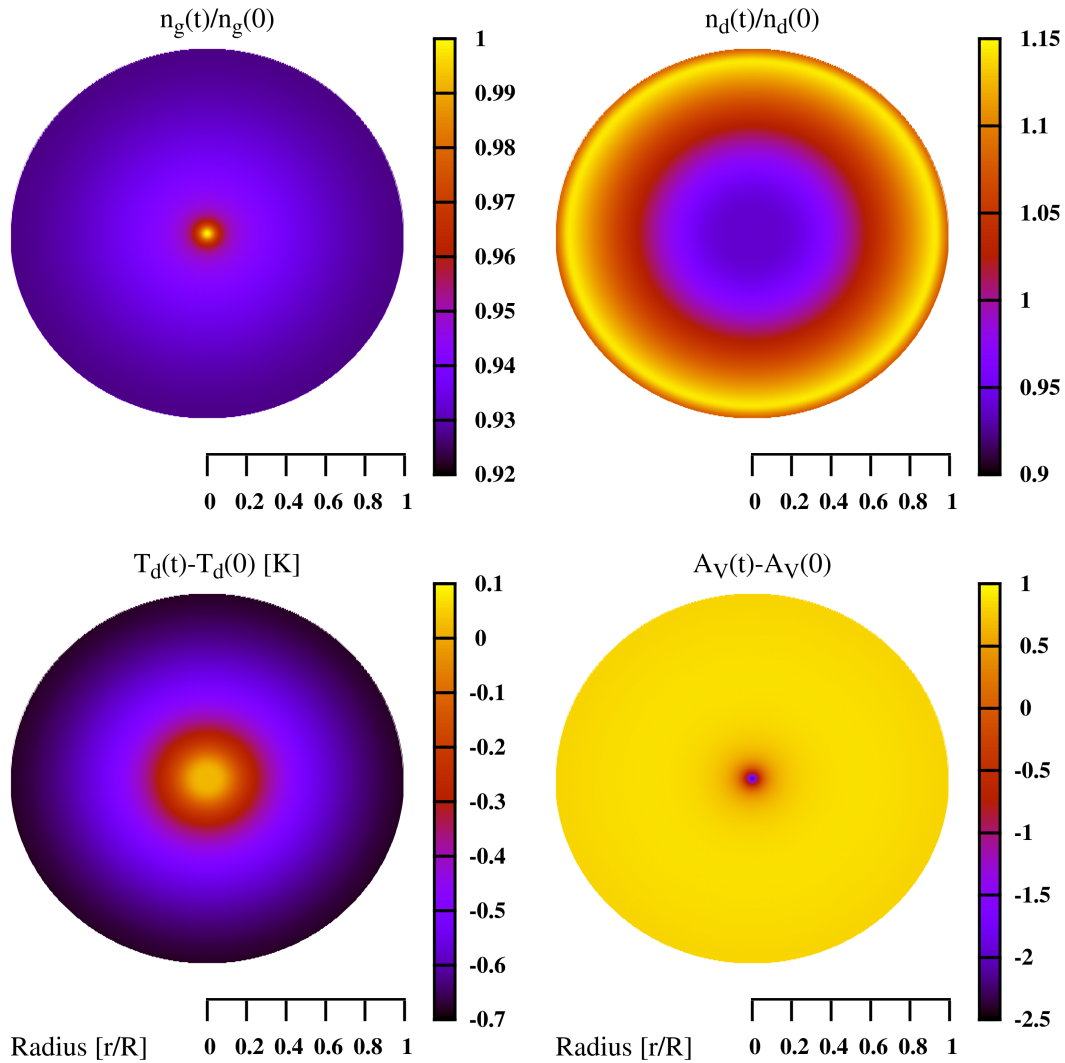


Abbildung 6.1: Typische Änderungen von Parametern des QSCC nach einer Entwicklungszeit von 10 Myr - Typische repräsentative quasi-stationäre Änderungen einiger wichtiger Parameter im vorliegenden Modell. Die Abbildung zeigt das Verhältnis der Gasdichte $\rho_g(r, t)/\rho_g(r, 0)$, der Staubbichte $\rho_d(r, t)/\rho_d(r, 0)$ im QSCC sowie die absolute Temperaturänderung des Staubs $T_d(r, t) - T_d(r, 0)$ und die absolute Veränderung der optischen Extinktion $A_V(r, t) - A_V(r, 0)$. Typische relative Änderungen aller Parameter sind klein und rechtfertigen die quasi-stationäre Näherung, die die Grundlage des Modells dieser Arbeit darstellt. Die Änderungen der Gasdichte beruhen auf der quasi-statischen Änderung der Gasdichte, die in Abschnitt 3.11 beschrieben wurde. Die zeitliche Änderung von $\rho_d(r, t)$ ist einerseits durch die Staubbewegung (vgl. Abschnitt 3.10) bedingt, andererseits durch die quasi-statische Änderung der Gasdichte. Sehr schön ist die Konzentration des Staubs in den äußeren Kernregionen (in diesem Falle bei $r \approx 0.92 \cdot R_c$) zu erkennen.

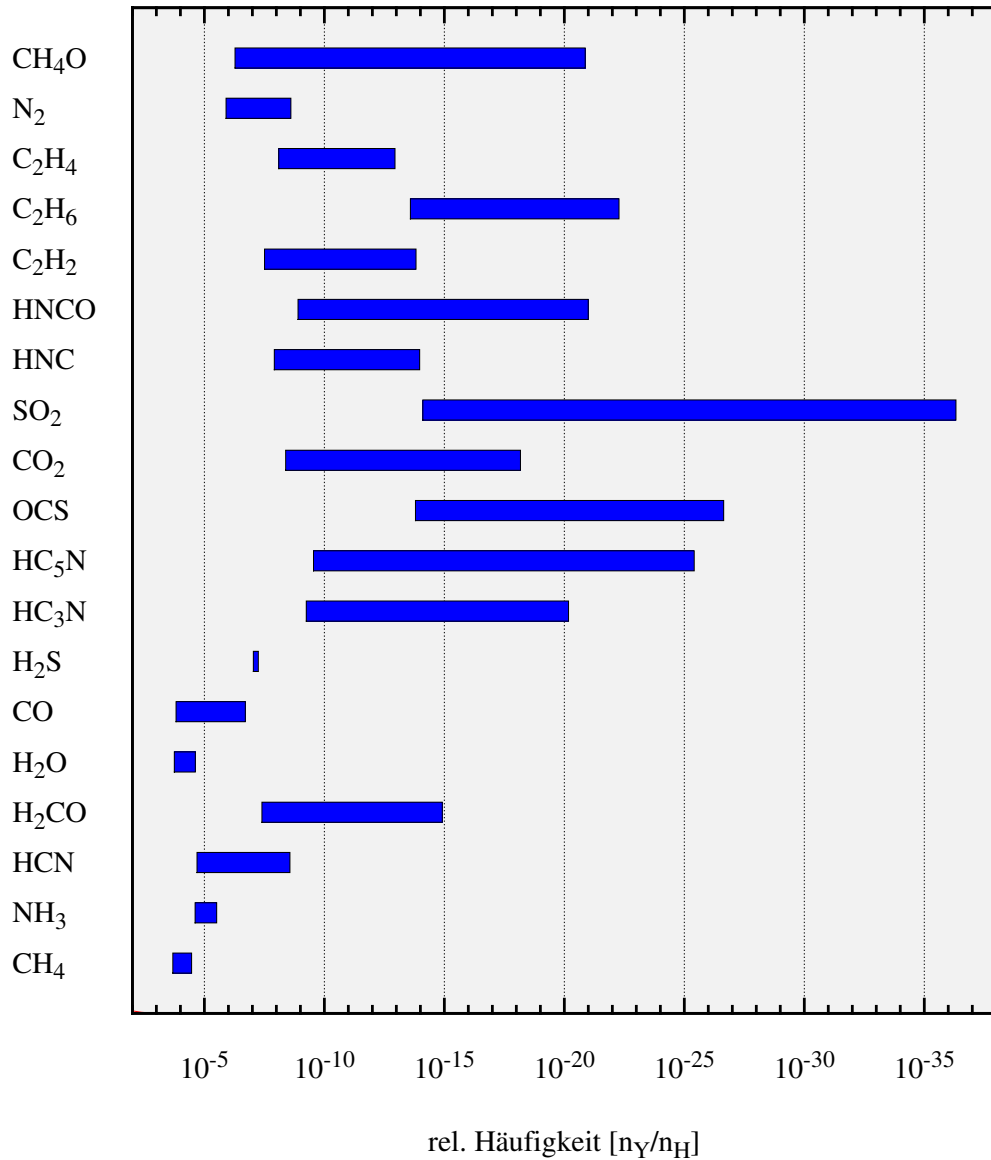


Abbildung 6.2: Variation der Häufigkeiten der in dieser Arbeit behandelten präbiotischen Spezies - Gezeigt ist die totale Variabilität der Konzentration einer gegebenen Spezies $n_Y = n_Y^{(Staub)} + n_Y^{(Gas)}$ für alle Orte und alle Zeiten $t \geq 2$ Myr sowie für alle berechneten QSCC. Dabei sind die meisten Spezies vornehmlich auf dem Staub aufgefroren, und nur wenige Spezies sind in Gas und Staub in ähnlichen Konzentrationen vorhanden (N_2 , H_2CO , HC_3N , HNC , C_2H_4). Einige wenige Spezies sind dabei sogar vornehmlich im Gas zu finden (SO_2 , OCS , C_2H_2). Als Bezeichnung für Methanol (CH_3OH) ist abkürzend die Summenformel CH_4O verwendet worden. Die Quelle der Variation liegt dabei neben der Variation der physikalischen Bedingungen in den betrachteten QSCC auch in der Variation der Konzentrationen der chemischen Spezies zu Beginn der Simulation (vgl. Abschnitt 4.3).

6. ERGEBNISSE

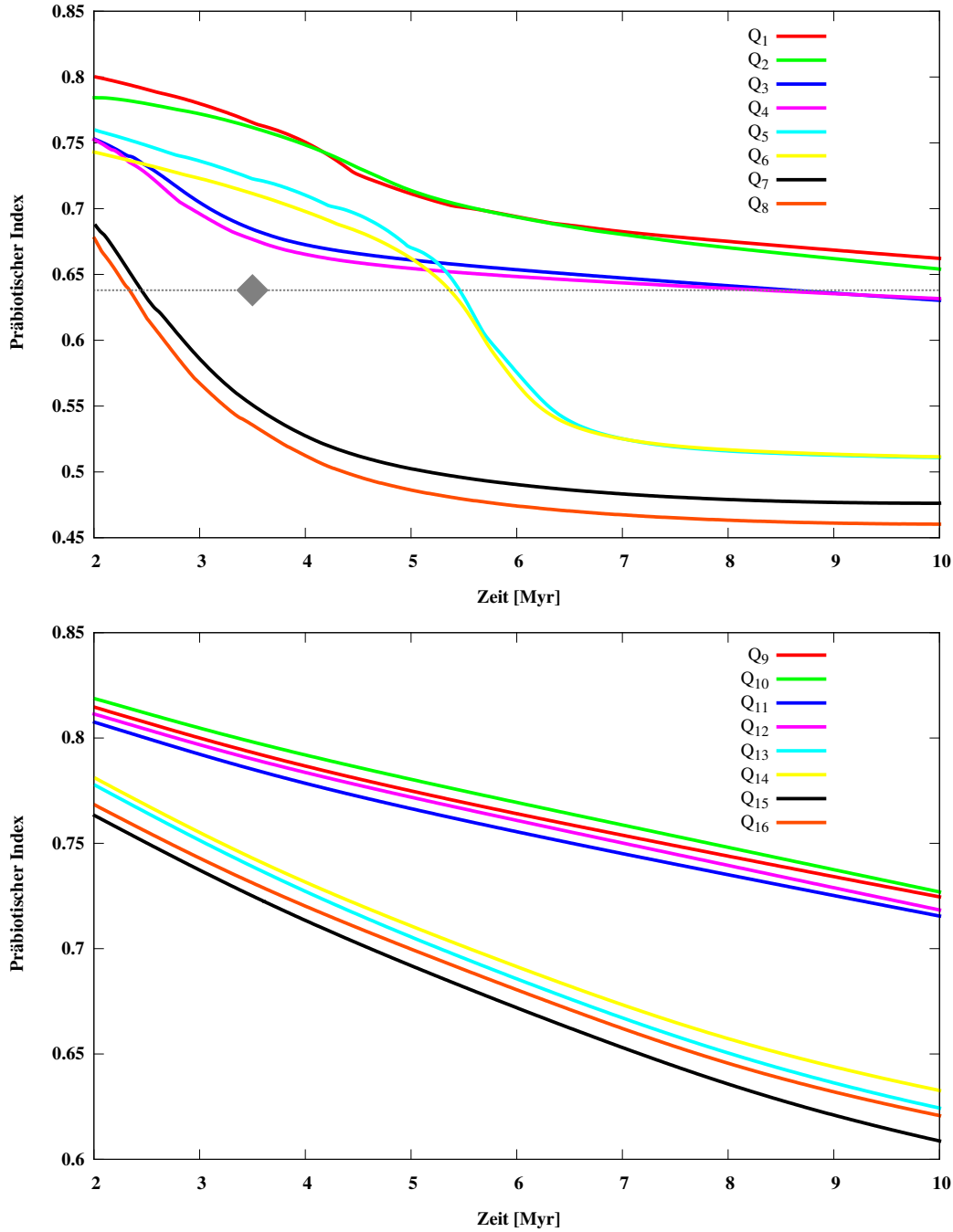


Abbildung 6.3: Präbiotischer Index für alle in dieser Arbeit berechneten QSCC mit einem C/O Verhältnis von 1.2 - Die Abbildung zeigt die zeitliche Abhängigkeit des präbiotischen Index (definiert in Gleichung 6.4) für alle in dieser Arbeit berechneten QSCC mit einem C/O -Verhältnis von 1.2. Die QSCC lassen sich diesen Ergebnissen zufolge in vier unterschiedliche Klassen aufteilen. Zum einen sind dies die tief eingebetteten QSCC mit $A_V^{(ext)} = 10$ entsprechend den Kernen Q₉-Q₁₆, zum anderen die weniger tief eingebetteten QSCC mit $A_V^{(ext)} = 3$ entsprechend den Kernen Q₁-Q₈. Innerhalb dieser Klassen (vgl. Tabelle 5.1) zeigen die QSCC mit einer BGS-Staubgrößenverteilung (vgl. ggf. 3.5) einen geringeren Gehalt an präbiotischen Molekülen. Für nur schwach abgeschirmte QSCC führt eine Erhöhung der Strahlungsintensität zudem zu einem signifikant geringeren präbiotischen Index. Die graue Raute zeigt zum Vergleich den anhand der Daten von Aikawa et al. (2005) berechneten präbiotischen Index.

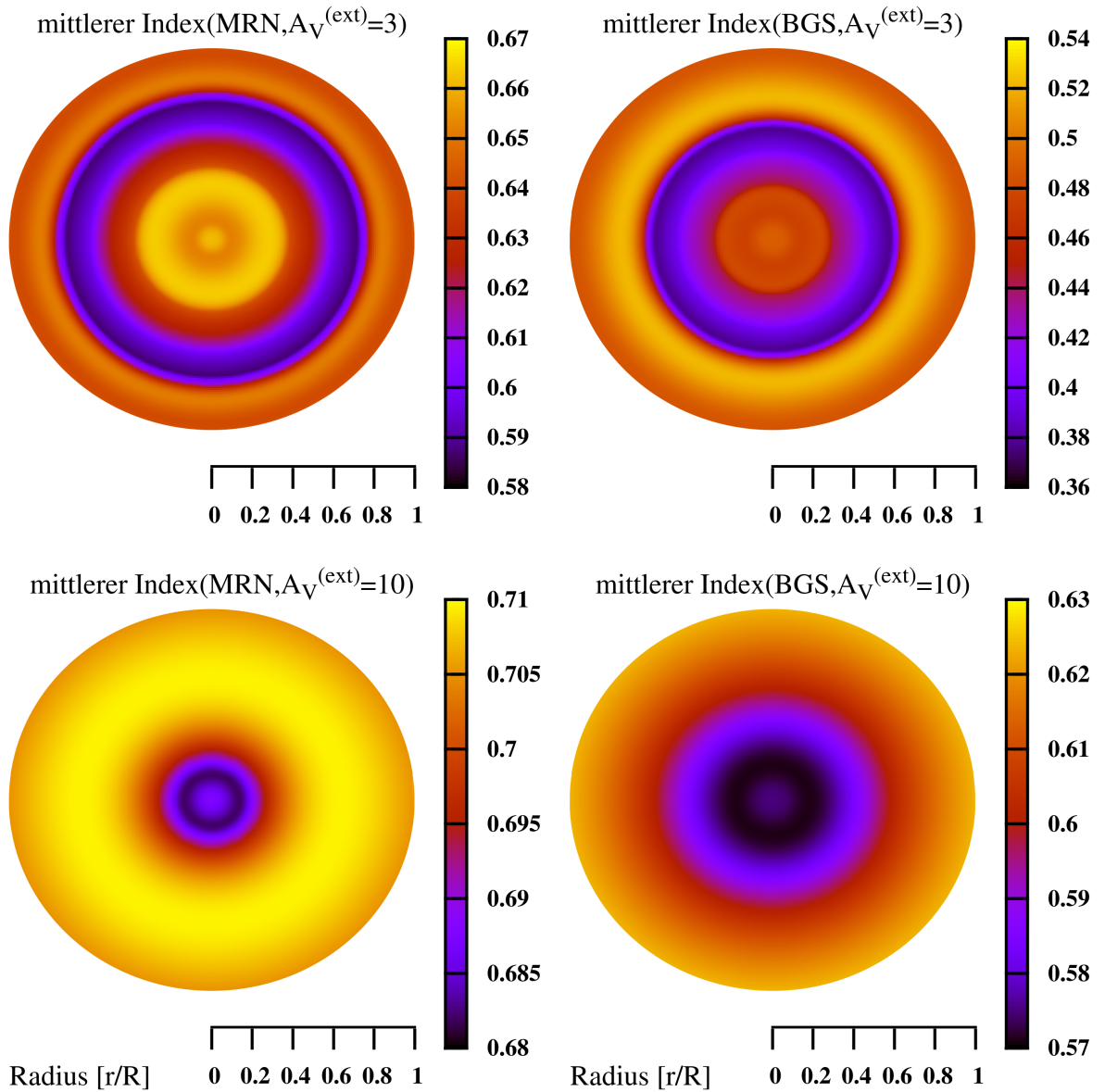


Abbildung 6.4: Mittlerer präbiotischer Index zum Ende der Simulation für die 4 verschiedenen Klassen der QSCC - Die Abbildung zeigt den mittleren präbiotischen Index $I_{\bar{V}}(r, t)$ wie er in Gleichung 6.2 definiert worden ist. Die Abbildung ist durch Mittelwertbildung der zu jeder Klasse gehörenden QSCC entstanden. Tiefer eingebettete QSCC besitzen einen größeren mittleren Gehalt an präbiotischen Molekülen und zeigen eine geringere radiale Variabilität des präbiotischen Index (vgl. ggf. Abbildung 6.3). Charakteristisch für die QSCC mit geringerer Einbettung, d.h. $A_V^{(ext)} = 3$, ist eine radiale Zone mit signifikant geringerem präbiotischem Index.

6. ERGEBNISSE

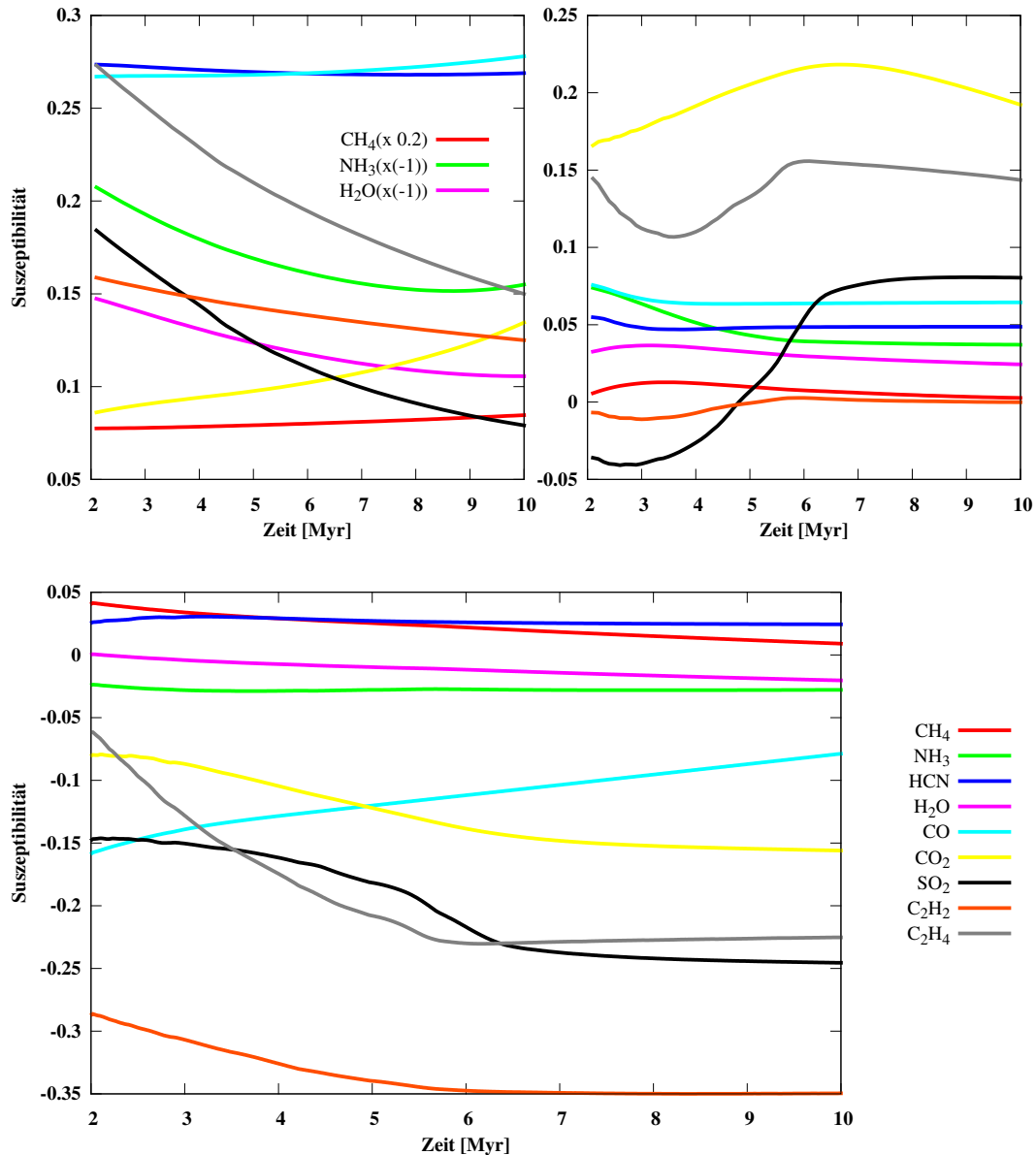


Abbildung 6.5: Suszeptibilität ausgewählter präbiotischer Spezies für die Änderung aller untersuchten Parameter - Die Abbildung zeigt den zeitlichen Verlauf der in Gleichung 6.6 definierten Suszeptibilität für jede in dieser Arbeit untersuchte Parameteränderung (vgl. Tabelle 6.1). Die linke obere Abbildung zeigt den zeitlichen Verlauf der Suszeptibilität bezüglich einer Änderung des C/O-Verhältnisses, während die rechte obere Abbildung den zeitlichen Verlauf der Suszeptibilität bezüglich der Änderung der externen Strahlungsintensität zeigt. Die untere Abbildung zeigt schließlich den zeitlichen Verlauf für die Suszeptibilität bezüglich der verwendeten Staubgrößenverteilung. Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind einige zeitliche Verläufe mit geeigneten Faktoren multipliziert worden. Höhere mittlere Konzentrationen präbiotischer Spezies sind mit einer geringeren Strahlungsintensität, einem größerem Gehalt an Kohlenstoff sowie mit der MRN-Staubgrößenverteilung assoziiert.

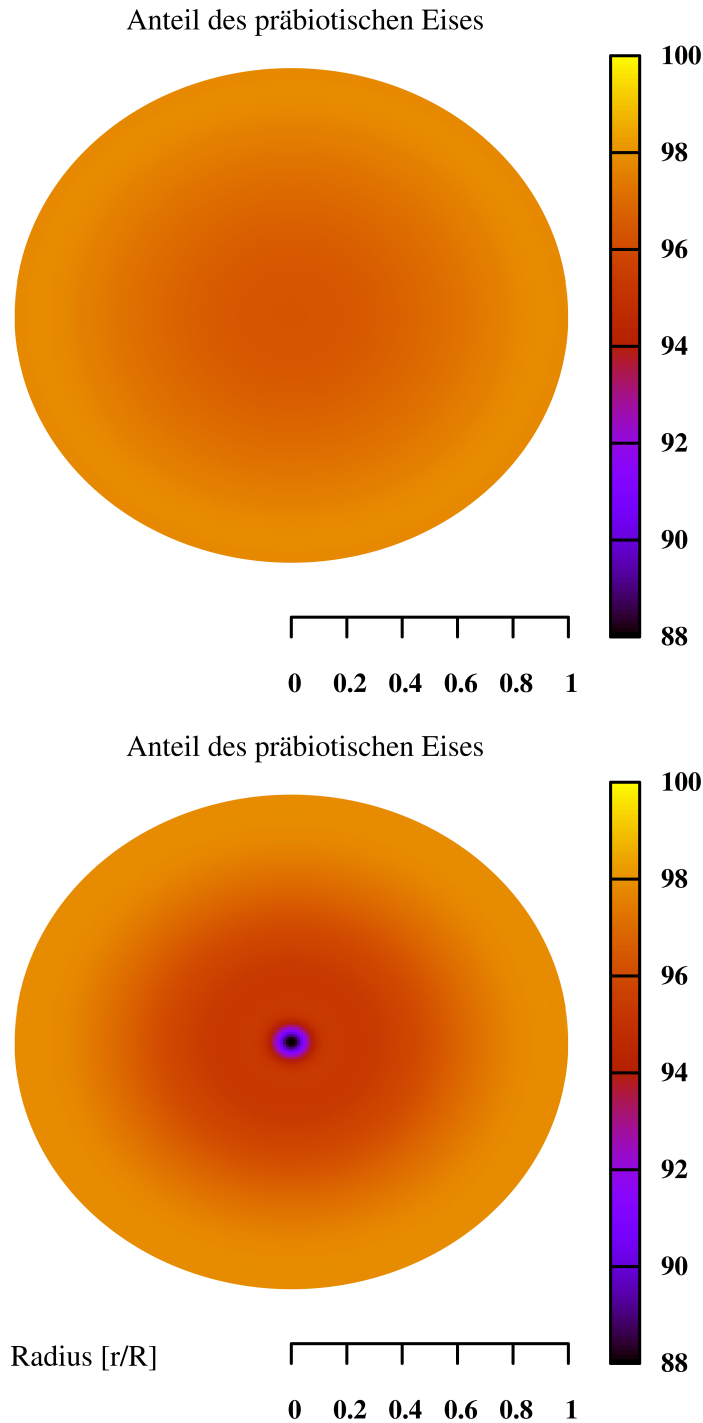


Abbildung 6.6: Einfluss der Dichtekongfiguration auf den Anteil der präbiotischen Eisspezies
- Die Abbildung zeigt den Anteil der präbiotischen Eisspezies am Gesamtgehalt aller Eisspezies zum Zeitpunkt $t = 10$ Myr, d.h. zum Ende der Simulation. Die Abbildung ist durch Mittelwertbildung von Kernen mit hoher zentraler Dichte und solchen mit geringer bzw. relativ geringer zentraler Dichte entstanden (vgl. ggf. Tabelle 5.1). Es zeigen sich Unterschiede zwischen Kernen mit hoher zentraler Dichte - in der unteren Abbildung zu sehen - gegenüber solchen mit geringer bzw. relativ geringer zentraler Dichte. Unterschiede in der Staubverteilung sowie in den chemischen Anfangsbedingungen oder der Einbettung haben hingegen einen vergleichsweise geringen Einfluss auf den Anteil der präbiotischen Eisspezies.

6. ERGEBNISSE

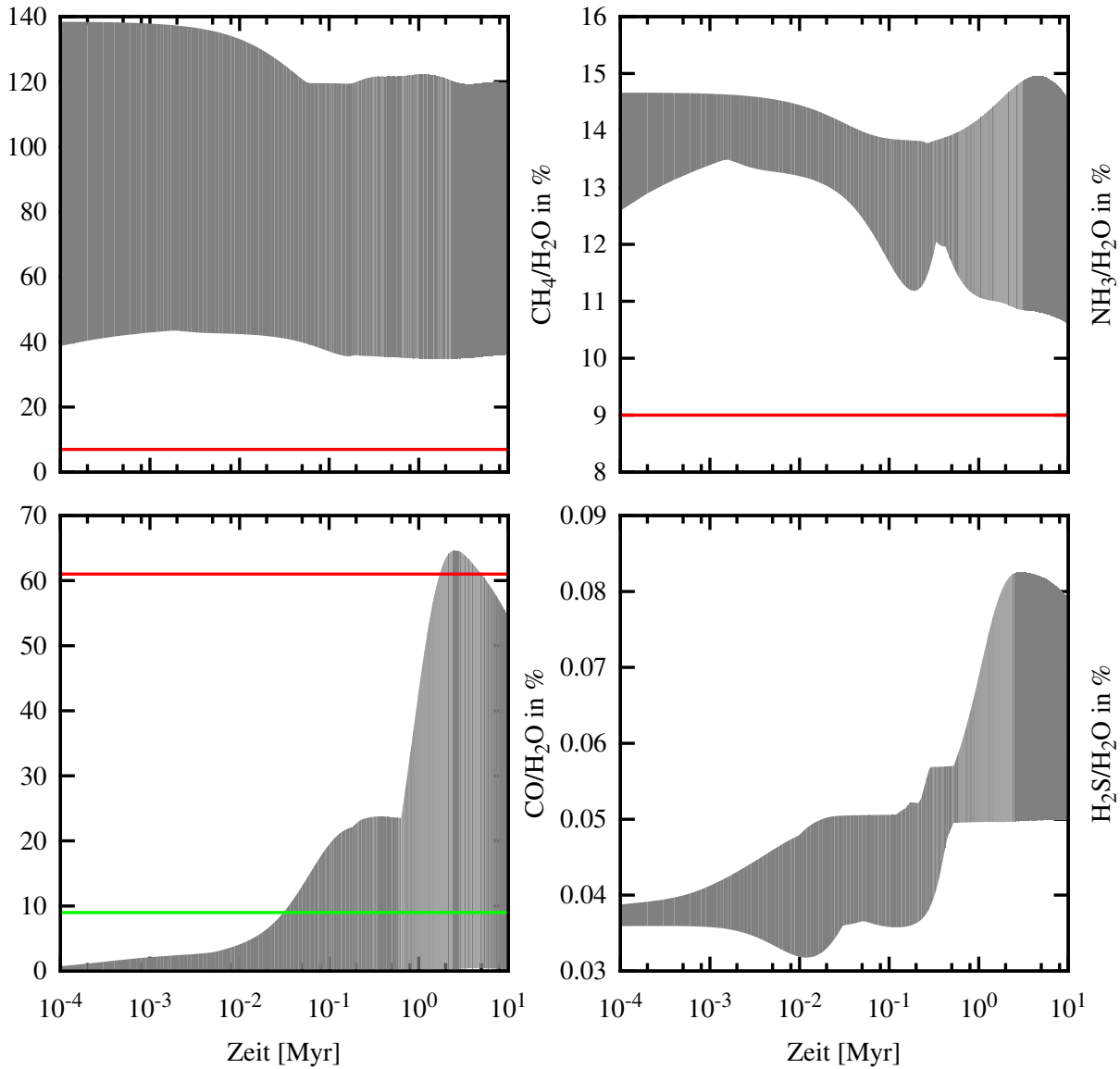


Abbildung 6.7: Zeitlicher Verlauf der simulierten Flächendichten $\bar{N}_Y(t)$ für die häufigsten präbiotischen Eisspezies - Die Abbildung zeigt den zeitlichen Verlauf bzw. den Bereich der simulierten Flächendichten $\bar{N}_Y(t)$ für die Spezies CH_4, NH_3, CO, H_2S in allen berechneten QSCC. Dabei zeigt sich, dass CH_4 und H_2O sowie CO die dominierenden Komponenten des Eises darstellen. Gegenüber CH_4 und H_2O weist CO eine größere Variabilität auf - ähnliches gilt für NH_3 auch wenn dessen Variabilität geringer ausfällt. Rote Linien markieren die obere durch Beobachtungen vorgegebene Grenze der Häufigkeit einer Spezies während grüne Linien die untere Grenze darstellen. Nicht berücksichtigt ist CO_2 , dessen Häufigkeit weit geringer ist als die der entsprechenden Beobachtungen (vgl. Tabelle 6.2). Methan (CH_4) weist eine größere Häufigkeit in den berechneten QSCC auf als es die Beobachtungen zeigen, was in geringem Maße auch für NH_3 zutrifft. Der Anteil von CO ist für einen Teil der Simulationen mit den Beobachtungen verträglich, H_2S für alle Simulationen mit der entsprechenden oberen Grenze aus den Beobachtungen (vgl. Tabelle 6.2). Die Resultate unterstreichen die enorme Bedeutung des C/O -Verhältnisses für die präbiotische Chemie.

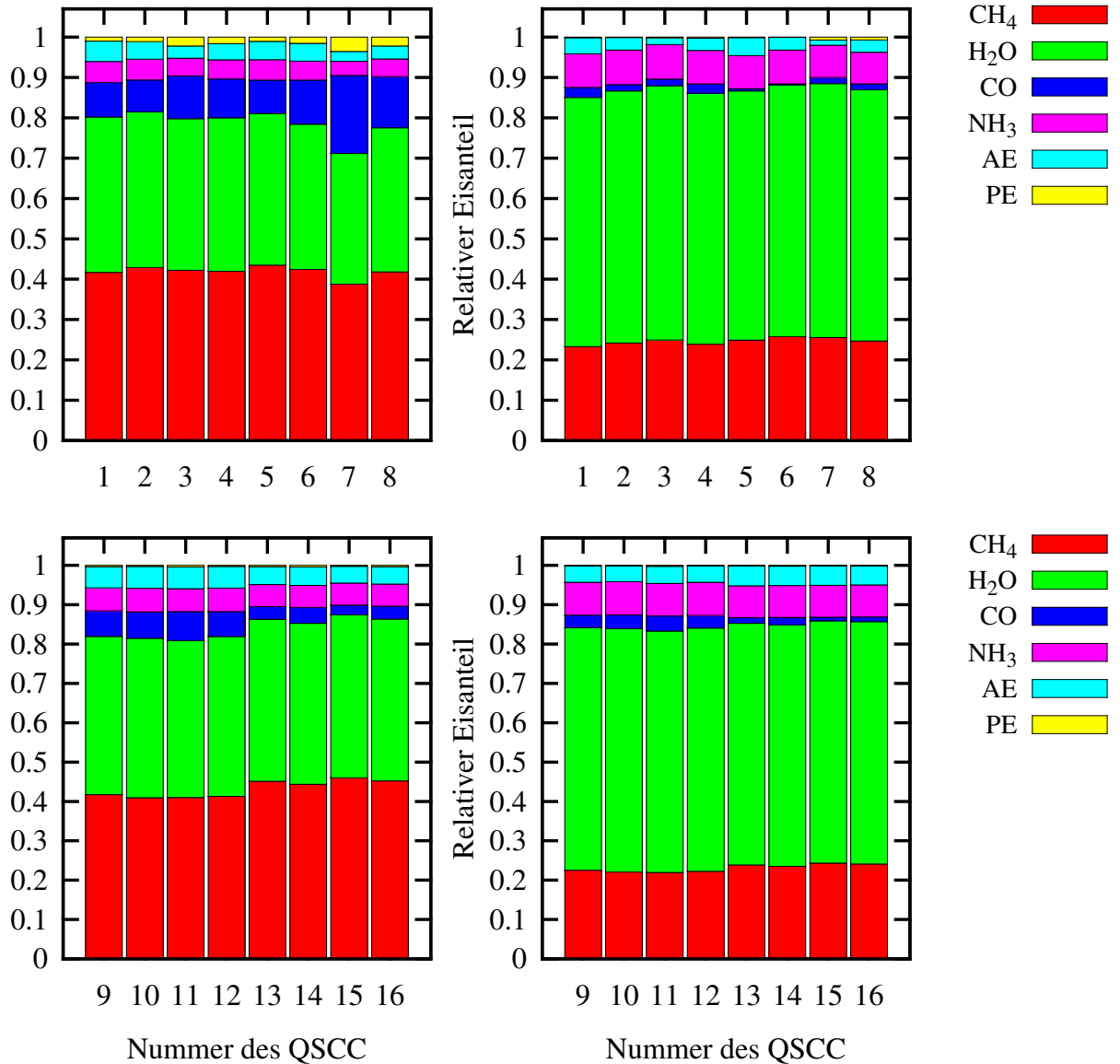


Abbildung 6.8: Durchschnittliche Eiszusammensetzung für $t \geq 2$ Myrs - Die Abbildung zeigt den durchschnittlichen Anteil der wichtigsten präbiotischen Eisspezies CH_4, H_2O, CO und NH_3 . Die Abbildung ist durch Mittelung der Resultate aller Zeiten $2 \leq t \leq 10$ Myrs für die jeweiligen QSCC (vgl. ggf. Tabelle 5.1) entstanden. Zusätzlich sind die verbleibenden präbiotische Eisspezies mit PE gekennzeichnet und eingetragen sowie nicht-präbiotische Eisspezies mit AE gekennzeichnet. Die obere Reihe entspricht den QSCC mit einer Einbettung von $A_V^{(ext)} = 3$ während die untere Reihe einer Einbettung der QSCC von $A_V^{(ext)} = 10$ entspricht. Jeweils links sind die QSCC mit einem hohen C/O -Verhältnis während sich rechts diejenigen mit einem niedrigen C/O -Verhältnis befinden. Man erkennt deutlich, dass die Spezies H_2O und CH_4 gegenüber den Spezies CO und NH_3 weniger empfindlich gegenüber den physikalischen Eigenschaften der jeweiligen QSCC sind und die dominieren Eiskomponenten für alle QSCC darstellen.

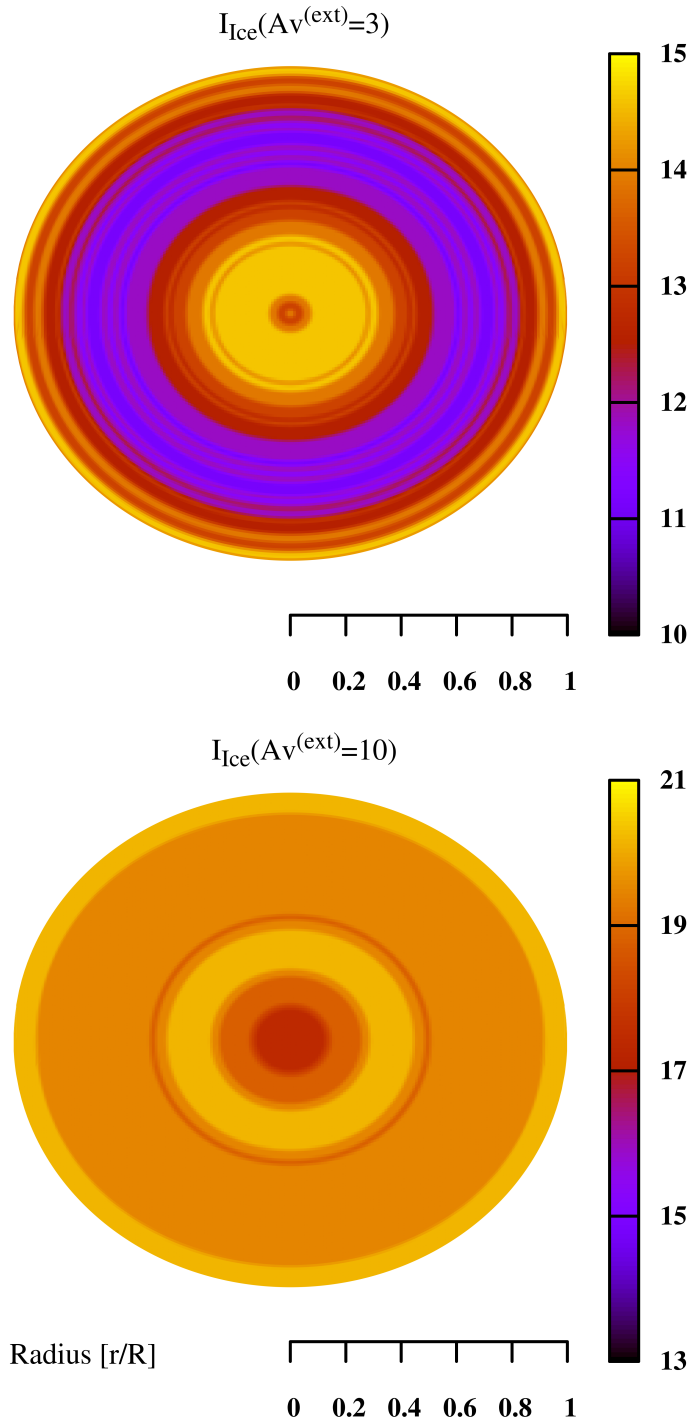


Abbildung 6.9: Vergleich der Eiszusammensetzung der berechneten QSCC mit der beobachteten Zusammensetzung in Kometen - Die Abbildung zeigt den Eis-Index, der in Gleichung 6.8 definiert wurde zum Zeitpunkt $t = 10$ Myrs. Die Daten der Zusammensetzung der Kometen wurden Mumma und Charnley (2011) und Despois und Cottin (2005) entnommen. Die Bilder sind durch Mittelwertbildung der Indizes für die QSCC mit jeweils einer der beiden verwendeten externen Abschirmungen (vgl. ggf. Tabelle 5.1) berechnet worden. Es zeigt sich, dass tiefer eingebettete QSCC eine Zusammensetzung des Eises haben, die eher den bei Kometen beobachteten Häufigkeiten entsprechen.

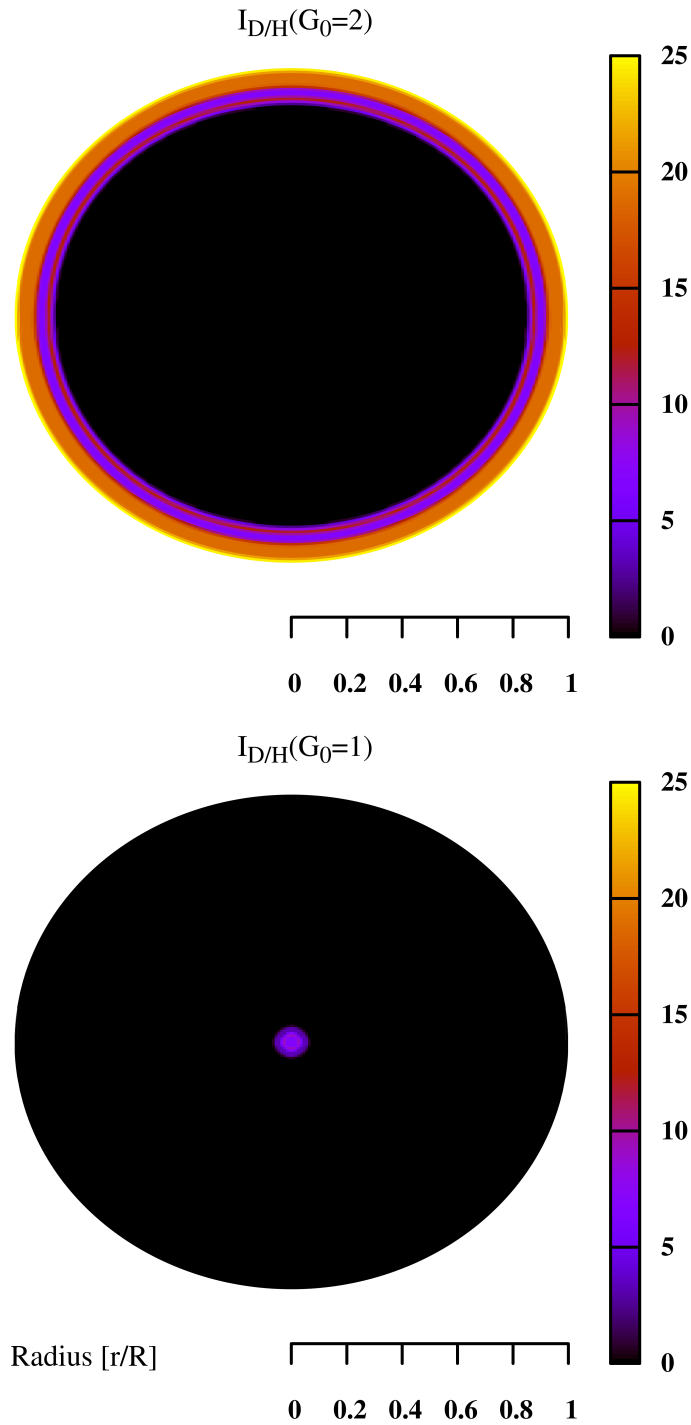


Abbildung 6.10: Vergleich der Isotopen-Zusammensetzung des Eises in den simulierten QSCC mit der in den Kometen beobachteten Zusammensetzung - Die Abbildung zeigt den Isotopen-Index $I_{D/H}$, der in Gleichung 6.10 definiert wurde zum Zeitpunkt $t = 10$ Myrs. Die Bilder sind durch Mittelwertbildung der Indizes für die QSCC mit jeweils einer der beiden verwendeten externen Strahlungsintensitäten G_0 (vgl. ggf. Tabelle 5.1) berechnet worden.

7

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit hat sich mit der quasi-stationären Vorläuferphase (d.h. geeigneten QSCC) beschäftigt, welche potentiell Vorläufer des heutigen Sonnensystems gewesen sein könnten. Der Schwerpunkt dieser Arbeit lag in der Untersuchung der Veränderungen der chemischen Zusammensetzung und Konzentration wichtiger präbiotischer Spezies sowie auch ihrer isotopischen Zusammensetzung. Um möglichst viele der strukturell verschiedenen QSCC berücksichtigen zu können, wurde in dieser Arbeit eine Variation einiger wesentlicher Parameter vorgenommen. Aus den so gewonnenen Daten der Simulationen lassen sich einige wesentliche Beobachtungen zusammenfassend herausstellen, was in den folgenden Abschnitten geschehen soll.

So lässt sich beobachten dass es zwei voneinander verschiedene Dichtekonfigurationen von QSCC für eine gegebene Strahlungsintensität bzw. Einbettung der QSCC gibt. Zum einen handelt es sich dabei um QSCC mit einer hohen zentralen Dichte $\rho_g(r = 0)$ und einem großen Dichteunterschied zum Rand des QSCC zum anderen handelt es sich um QSCC die einen geringen Dichteunterschied aufweisen mit einer entsprechend geringeren zentralen Dichte. Beide Konfigurationen weisen einen hinreichenden Randdruck und einen hinreichende Masse auf und könnten somit potentiell QSCC gewesen sein die letztlich zur Entstehung eines Sonnensystems wie dem unsrigen geführt haben.

Es lässt sich weiterhin anhand der Konzentrationen der Spezies, die in dieser Arbeit untersucht wurden (vgl. Kapitel 5.2), beobachten, dass die Variabilität der betrachteten präbiotischen Moleküle sehr unterschiedlich ist. Einige präbiotische Spezies wie SO_2 , CO_2 , CH_4O und $HNCO$ zeigen eine enorme Variabilität, welche einige Größenordnungen beinhaltet. Andere präbiotische Spezies wie H_2S , H_2O , CH_4 und NH_3 zeigen dagegen eine sehr geringe Variabilität. Die Variabilität des Methans (CH_4) lässt sich dabei zu großen Teilen durch die Variabilität des C/O -Verhältnisses erklären, wie anhand der Auswertung der Daten zur Suszeptibilität ersichtlich geworden ist. Daraus lässt sich insbesondere schlussfolgern, dass man in einem QSCC, der potentiell ein Vorläufer des heutigen Sonnensystems gewesen sein könnte, eine hohe Konzentration der präbiotischen Spezies H_2O , CH_4 und NH_3 erwarten kann. Dabei sind H_2O und CH_4 die Spezies, die die größten Konzentrationen besitzen und in denen der weitaus größte

7. ZUSAMMENFASSUNG

Teil des vorhandenen Sauerstoffs bzw. Kohlenstoffs eingebaut sein wird. Weiterhin zeigt sich, dass die Zusammensetzung der Konzentrationen der präbiotischen Moleküle signifikant zeitabhängig ist ebenso wie die Eiszusammensetzung. Dies rechtfertigt zum einen die Anwendung der chemischen Kinetik und zeigt zum anderen, dass der Zeitpunkt des Eintritts des Kollapses für die Konzentration der präbiotischen Spezies bedeutsam sein kann. Speziell die korrekte Beschreibung der Häufigkeiten der präbiotischen Spezies erfordert eine Erweiterung des in dieser Arbeit verwendeten Modells, wie die Daten gezeigt haben.

Die in dieser Arbeit vorliegenden Daten zeigen aber auch, dass die *mittlere* Konzentration an präbiotischen Spezies in gut abgeschirmten QSCC höher ist, als in weniger gut abgeschirmten QSCC. Dies entspricht in Bezug auf ihren präbiotischen Gehalt zwei verschiedenen Typen von QSCC - ein Ergebnis, welches besonders anhand des präbiotischen Index deutlich wird. Ein potentieller Vorläufer des heutigen Sonnensystems hätte demnach je nach seiner Lage innerhalb der Riesenmolekülwolke ein unterschiedliches Reservoir an präbiotischen Molekülen. Neben dem Grad der Einbettung bzw. Abschirmung zeigt sich, dass auch die Staubgrößenverteilung einen großen Einfluss auf die mittlere Konzentration an präbiotischen Molekülen besitzt. So zeigen QSCC mit einer BGS-Größenverteilung einen niedrigeren mittleren Gehalt an präbiotischen Molekülen als dies bei QSCC mit einer MRN-Größenverteilung der Fall ist. Dieses Resultat unterstreicht die Bedeutung der katalytisch wirksamen Oberfläche der Staubkörner sowie der Wechselwirkung zwischen Staub- und Gasphase in einem QSCC. Dies gilt umso mehr, wenn man bedenkt, dass die Größenverteilung der Staubkörner auch einen signifikanten Einfluss auf die physikalische Struktur des QSCC besitzt, wie anhand der Struktur der simulierten QSCC ersichtlich wird.

Neben der Konzentration an wichtigen präbiotischen Molekülen sind auch die D/H- sowie N/X-Isotopenverhältnisse Gegenstand der Betrachtungen dieser Arbeit gewesen. Diese Isotopenverhältnisse ermöglichen es, potentiell Rückschlüsse auf die Ursprünge des Materials zu machen, welches in der späten Akkretionsphase in die Planeten bzw. deren Embryos eingebracht wurde. Natürlich ist dazu ein weit umfangreicheres Modell erforderlich, als es in dieser Arbeit beschrieben wurde. Die Bedeutung der Arbeit für diese Fragestellung beruht in der Entstehungsgeschichte eines Sonnensystems, für das die quasi-stationäre Phase ein charakteristischer Vorläufer ist. Anhand der simulierten Daten lassen sich nun verschiedene Beobachtungen machen. Es zeigt sich zunächst, dass die Variabilität des N/X-Isotopenverhältnisses geringer als die Variabilität des D/H-Isotopenverhältnisses ist. Dies ist zumindest teilweise auf eine entsprechend verringerte Anreicherung in den Reaktionen der Gasphase zurückzuführen. Insgesamt zeigen alle Isotopenverhältnisse eine relativ geringe Abhängigkeit von der Variabilität äußerer Parameter wie beispielsweise die Größe der Einbettung. Ihre Variabilität ist somit zum größten Teil durch Variation der physikalisch-chemischen Bedingungen - wie zum Beispiel des Strahlungsfeldes - *innerhalb* eines QSCC verursacht.

Aufgrund einer Vielzahl an Beobachtungen und Untersuchungen besteht Übereinkunft darüber, dass Kometen nur relativ geringfügigen Transformationen unterlagen und relativ ursprüngliches

Material darstellen. Ein Vergleich der für Kometen gemessenen Isotopenverhältnisse mit den in dieser Arbeit berechneten Werten zeigt eine nur teilweise passende Übereinstimmung der Isotopenzusammensetzung und lässt es als wenig wahrscheinlich erscheinen, dass das im QSCC vorhandene Material *unmittelbar* Ausgangspunkt der Entstehung von Kometen gewesen sein könnte. Es erscheint wahrscheinlicher, dass das im QSCC vorhandene Material weiteren Transformationen unterlegen gewesen sein sollte, wie sie im Kollaps und der Scheibe auftreten. Die größte Übereinstimmung der Isotopenverhältnisse sowie der Zusammensetzung des Eises mit beobachteten Häufigkeiten auf Kometen, lässt sich dabei in den QSCC mit einer hohen Strahlungsintensität (d.h. $G_0 = 2$) und geringer Einbettung (d.h. $A_V^{(ext)} = 3$) beobachten. In diesen QSCC findet man insbesondere in den äußeren Zonen $r \gtrsim 0.5 \cdot R_c$ sowie in den zentralen Zonen $r \lesssim 0.1 \cdot R_c$ Bereiche, in welchen sich relativ gute Übereinstimmungen der Eiszusammensetzung finden lassen. Diese Übereinstimmungen haben eine höhere Güte, falls ein größerer Wert des C/O-Verhältnisses vorliegt. Tief eingebettete QSCC (d.h. $A_V^{(ext)} = 10$) zeigen hingegen eine bessere Übereinstimmung mit den bei Kometen beobachteten Eis-Zusammensetzungen, wie anhand der Daten ersichtlich ist. Die Übereinstimmung der Isotopenverhältnisse dagegen ist sehr gering.

Bei den in dieser Arbeit untersuchten Intensitäten des wirkenden Strahlungsfeldes haben die Daten aus den vorliegenden Simulationen keine bzw. eine vernachlässigbare direkte Abhängigkeit der veränderlichen Staubkonzentrationen erbracht. Die Bedeutung der globalen durch die Staubbewegung induzierten Änderungen der physikalischen Eigenschaften eines QSCC sind in dieser Arbeit nicht hinreichend genau untersucht worden und erfordern weitergehende Betrachtungen. Einen signifikanten Einfluss auf die mittlere Häufigkeit der präbiotischen Moleküle besitzt die Staubgröße bzw. die Staubgrößenverteilung der Staubkörner wie die Auswertung der Suszeptibilitäten und des Gehaltes präbiotischer Spezies gezeigt hat. Dies ließ sich qualitativ insbesondere anhand des präbiotischen Indexes zeigen.

7. ZUSAMMENFASSUNG













Literaturverzeichnis

- F. C. Adams. **The Birth Environment of the Solar System.** *Annu. Rev. Astron. & Astrophys.*, 48:47–85, September 2010. doi: 10.1146/annurev-astro-081309-130830. 🌐. 3, 4
- Y. Aikawa, E. Herbst, H. Roberts, und P. Caselli. **Molecular Evolution in Collapsing Prestellar Cores. III. Contraction of a Bonnor-Ebert Sphere.** *Astrophys. J.*, 620:330–346, February 2005. doi: 10.1086/427017. 🌐. 8, 27, 28, 29, 37, 66, 134
- Y. Aikawa, S. M. Miyama, T. Nakano, und T. Umebayashi. **Evolution of Molecular Abundance in Gaseous Disks around Young Stars: Depletion of CO Molecules.** *Astrophys. J.*, 467:684–+, August 1996. doi: 10.1086/177644. 🌐. 21, 106, 123
- Y. Aikawa, N. Ohashi, und E. Herbst. **Molecular Evolution in Collapsing Prestellar Cores. II. The Effect of Grain-Surface Reactions.** *Astrophys. J.*, 593:906–924, August 2003. doi: 10.1086/376616. 🌐. 27, 29
- Y. Aikawa, N. Ohashi, S.-i. Inutsuka, E. Herbst, und S. Takakuwa. **Molecular Evolution in Collapsing Prestellar Cores.** *Astrophys. J.*, 552:639–653, May 2001. doi: 10.1086/320551. 🌐. 27, 29
- Y. Aikawa, V. Wakelam, R. T. Garrod, und E. Herbst. **Molecular Evolution and Star Formation: From Prestellar Cores to Protostellar Cores.** *Astrophys. J.*, 674:984–996, February 2008. doi: 10.1086/524096. 🌐. 27, 29
- Y. Aikawa, V. Wakelam, F. Hersant, R. T. Garrod, und E. Herbst. **From Prestellar to Protostellar Cores. II. Time Dependence and Deuterium Fractionation.** *Astrophys. J.*, 760:40, November 2012. doi: 10.1088/0004-637X/760/1/40. 🌐. 124, 125
- T. Albertsson, D. A. Semenov, A. I. Vasyunin, T. Henning, und E. Herbst. **New Extended Deuterium Fractionation Model: Assessment at Dense ISM Conditions and Sensitivity Analysis.** *Astrophys. J. Suppl.*, 207:27, August 2013. doi: 10.1088/0067-0049/207/2/27. 🌐. 28, 29, 98, 102, 103, 104, 105, 106
- D. Alfè und M. J. Gillan. **Ab initio statistical mechanics of surface adsorption and desorption. I. H₂O on MgO (001) at low coverage.** *J. Chem. Phys.*, 127(11):114709, September 2007. doi: 10.1063/1.2772258. 🌐. 94
- J. L. Alonso, X. Andrade, P. Echenique, F. Falseto, D. Prada-Gracia, und A. Rubio. **Efficient Formalism for Large-Scale Ab Initio Molecular Dynamics based on Time-Dependent Density Functional Theory.** *Phys. Rev. Lett.*, 101:096403, Aug 2008. 12
- Martin Arnold, Bernhard Burgermeister, und Alexander Eichberger. **Linearly implicit time integration methods in real-time applications: DAEs and stiff ODEs.** *Multibody System Dynamics*, 17:99–117, 2007. 🌐. 28, 91
- G. Arreaga-García, J. Klapp, L. D. G. Sigalotti, und R. Gabbasov. **Gravitational Collapse and Fragmentation of Molecular Cloud Cores with GADGET-2.** *Astrophys. J.*, 666:290–














- 308, September 2007. doi: 10.1086/520492. 85, 40
- R. Bachiller. **Bipolar Molecular Outflows from Young Stars and Protostars.** *Annu. Rev. Astron. & Astrophys.*, 34:111–154, 1996. doi: 10.1146/annurev.astro.34.1.111. 85, 111
- A. Bacmann, P. André, J.-L. Puget, A. Abergel, S. Bontemps, und D. Ward-Thompson. **An ISOCAM absorption survey of the structure of pre-stellar cloud cores.** *Astron. & Astrophys.*, 361:555–580, September 2000. 11, 38, 40
- J. L. Bada. **How life began on Earth: a status report.** *Earth Planet. Sci. Lett.*, 226:1–15, 2004. doi: 10.1016/j.epsl.2004.07.036. 4, 113
- N. Balucani. **Elementary Reactions and Their Role in Gas-Phase Prebiotic Chemistry.** *Int. J. Mol. Sci.*, 10(5):2304–2335, 2009. doi: 10.3390/ijms10052304. 113, 114
- B. Barzel und O. Biham. **Efficient Simulations of Interstellar Gas-Grain Chemistry Using Moment Equations.** *Astrophys. J. Lett.*, 658: L37–L40, March 2007a. doi: 10.1086/513421. 17, 19, 26, 29, 30
- B. Barzel und O. Biham. **Efficient stochastic simulations of complex reaction networks on surfaces.** *J. Chem. Phys.*, 127(14):144703, October 2007b. doi: 10.1063/1.2789417. 26, 33
- B. Barzel und O. Biham. **Simulations of water-ice formation on dust grains using moment equations.** In *Molecules in Space and Laboratory*, December 2007c. 26
- B. Barzel und O. Biham. **Quantifying the connectivity of a network: The network correlation function method.** *Phys. Rev. E*, 80(4): 046104, October 2009a. doi: 10.1103/PhysRevE.80.046104. 26
- B. Barzel und O. Biham. **Stochastic analysis of dimerization systems.** *Phys. Rev. E*, 80(3): 031117, September 2009b. doi: 10.1103/PhysRevE.80.031117. 26
- B. Barzel und O. Biham. **Binomial Moment Equations for Stochastic Reaction Systems.** *Phys. Rev. Lett.*, 106(15):150602, April 2011. doi: 10.1103/PhysRevLett.106.150602. 26
- B. Barzel, O. Biham, und R. Kupferman. **Evaluation of the multiplane method for efficient simulations of reaction networks.** *Phys. Rev. E*, 76(2):026703, August 2007. doi: 10.1103/PhysRevE.76.026703. 26
- S. Basu und H. M. Antia. **Helioseismology and solar abundances.** *Phys. Rep.*, 457:217–283, March 2008. doi: 10.1016/j.physrep.2007.12.002. 98
- E. A. Bergin und M. Tafalla. **Cold Dark Clouds: The Initial Conditions for Star Formation.** *Annu. Rev. Astron. & Astrophys.*, 45:339–396, September 2007. doi: 10.1146/annurev.astro.45.071206.100404. 3, 4, 8, 11, 40, 69, 70, 111
- P. Bergman, B. Parise, R. Liseau, B. Larsson, H. Olofsson, K. M. Menten, und R. Güsten. **Detection of interstellar hydrogen peroxide.** *Astron. & Astrophys.*, 531:L8, July 2011. doi: 10.1051/0004-6361/201117170. 4
- O. Biham, I. Furman, V. Pirronello, und G. Vidali. **Master Equation for Hydrogen Recombination on Grain Surfaces.** *Astrophys. J.*, 553: 595–603, June 2001. doi: 10.1086/320975. 17, 93
- O. Biham und A. Lipshtat. **Exact results for hydrogen recombination on dust grain surfaces.** *Phys. Rev. E*, 66(5):056103, November 2002. doi: 10.1103/PhysRevE.66.056103. 20, 29, 93
- K. Binder. **Monte Carlo methods in statistical physics.** Topics in current physics. Springer-Verlag, 1986. ISBN 9780387165141. 23, 25

- J. H. Black. **Chemistry and cosmology.** *Faraday Discuss.*, 133:27–32, 2006. doi: 10.1039/B516837F. 98
- J. Blum und G. Wurm. **The Growth Mechanisms of Macroscopic Bodies in Protoplanetary Disks.** *Annu. Rev. Astron. & Astrophys.*, 46:21–56, September 2008. doi: 10.1146/annurev.astro.46.060407.145152. 4, 58, 128
- T.S. Blyth und E.F. Robertson. **Basic Linear Algebra.** Springer Undergraduate Mathematics Series. Springer, 2002a. 91
- T.S. Blyth und E.F. Robertson. **Further Linear Algebra.** Springer Undergraduate Mathematics Series. Springer, 2002b. 91
- W. Boland und T. de Jong. **Hydrostatic models of molecular clouds. II - Steady state models of spherical clouds.** *Astron. & Astrophys.*, 134: 87–98, May 1984. 8, 27, 28
- W. B. Bonnor. **Boyle's Law and gravitational instability.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 116:351–+, 1956. 3, 8, 9, 38, 66
- A. Brack. **From the Origin of Life on Earth to Life in the Universe.** In M. Gargaud, B. Barbier, H. Martin, und J. Reisse, editors, *Lectures in Astrobiology*, pages 3–23. 2005. 4, 113
- Ilja N. Bronstein, Konstantin A. Semendjajew, und Gerhard Musiol. **Taschenbuch der Mathematik.** Deutsch (Harri), August 2005. 47, 76
- N.P. Brown und A.C. Hindmarsh. **Reduced storage matrix methods in stiff ODE systems.** *Appl. Math. Comp.*, 31:40–91, 1989. doi: 10.1016/0096-3003(89)90110-0. 16, 23, 28, 91, 102
- Peter N. Brown, George D. Byrne, und Alan C. Hindmarsh. **VODE: A Variable-Coefficient ODE Solver.** *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 10(5):1038–1051, 1989. doi: 10.1137/0910062. 16, 21, 23, 28, 91, 102
- R. D. Brown und E. H. N. Rice. **Galactochemistry - Part One - Influence of Initial Conditions on Predicted Abundances.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 223:405, November 1986a. 21, 102, 106
- R. D. Brown und E. H. N. Rice. **Galactochemistry - Part Two - Interstellar Deuterium Chemistry.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 223: 429, November 1986b. 21, 102, 106
- W. A. Brown und A. S. Bolina. **Fundamental data on the desorption of pure interstellar ices.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 374:1006–1014, January 2007. doi: 10.1111/j.1365-2966.2006.11216.x. 94
- P. Bryans, H. Kreckel, E. Roueff, V. Wakelam, und D. W. Savin. **Molecular Cloud Chemistry and the Importance of Dielectronic Recombination.** *Astrophys. J.*, 694:286–293, March 2009. doi: 10.1088/0004-637X/694/1/286. 98
- A. Burkert und J. Alves. **The Inevitable Future of the Starless Core Barnard 68.** *Astrophys. J.*, 695:1308–1314, April 2009. doi: 10.1088/0004-637X/695/2/1308. 3, 8, 9, 11, 40, 68
- Yang Cao, Daniel T. Gillespie, und Linda R. Petzold. **Efficient step size selection for the tau-leaping simulation method.** *J. Chem. Phys.*, 124:044109, 2006. doi: 10.1063/1.2159468. 24
- Yang Cao, Daniel T. Gillespie, und Linda R. Petzold. **The adaptive explicit-implicit tau-leaping method with automatic tau selection.** *J. Chem. Phys.*, 126:2007, 2007. 24
- Yang Cao, Hong Li, und Linda Petzold. **Efficient formulation of the stochastic simulation algorithm for chemically reacting systems.** *J.*

- Chem. Phys.*, 121(9):4059–4067, 2004. doi: 10.1063/1.1778376. 24
- J.R. Cash und I. Gladwell. **Computational ordinary differential equations: based on the proceedings of a conference on computational ordinary differential equations.** Clarendon Press, 1992. 16, 23, 28, 91, 102
- S. Chandrasekhar. **Radiative Transfer.** Dover Books on Physics. Dover Publications, 1960. ISBN 9780486605906. 42
- Barbara Chapman, Gabriele Jost, und Ruud van der Pas. **Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming (Scientific and Engineering Computation).** The MIT Press, 2007. ISBN 0262533022, 9780262533027. 23
- S. B. Charnley. **Stochastic Astrochemical Kinetics.** *Astrophys. J. Lett.*, 509:L121–L124, December 1998. doi: 10.1086/311764. 23, 30
- S. B. Charnley. **Stochastic Theory of Molecule Formation on Dust.** *Astrophys. J. Lett.*, 562:L99–L102, November 2001. doi: 10.1086/324753. 23, 30
- S. B. Charnley und S. B. Rodgers. **Theoretical Models of Complex Molecule Formation on Dust.** In K. J. Meech, J. V. Keane, M. J. Mumma, J. L. Siefert, und D. J. Werthimer, editors, *Bioastronomy 2007: Molecules, Microbes and Extraterrestrial Life*, volume 420 of *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, page 29, December 2009. 23, 29
- D C Clary. **Fast Chemical Reactions: Theory Challenges Experiment.** *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 41(1):61–90, 1990. 12
- W. Coffey, Y.P. Kalmykov, und J.T. Waldron. **The Langevin Equation: With Applications in Physics, Chemistry, and Electrical Engineering.** World Scientific Series in Contemporary Chemical Physics. World Scientific, 1996. ISBN 9789810216511. 23, 25
- A. Crapsi, P. Caselli, M. C. Walmsley, und M. Tafalla. **Observing the gas temperature drop in the high-density nucleus of L 1544.** *Astron. & Astrophys.*, 470:221–230, July 2007. doi: 10.1051/0004-6361:20077613. 9, 29, 58
- R. M. Crutcher. **Magnetic Fields in Molecular Clouds: Observations Confront Theory.** *Astrophys. J.*, 520:706–713, August 1999. doi: 10.1086/307483. 3, 8
- A. Das, K. Acharyya, S. Chakrabarti, und S. K. Chakrabarti. **Formation of water and methanol in star forming molecular clouds.** *Astron. & Astrophys.*, 486:209–220, July 2008. doi: 10.1051/0004-6361:20078422. 21
- S. J. Desch. **Mass Distribution and Planet Formation in the Solar Nebula.** *Astrophys. J.*, 671:878–893, December 2007. doi: 10.1086/522825. 85, 111
- D. Despois und H. Cottin. **Comets: Potential Sources of Prebiotic Molecules for the Early Earth.** In M. Gargaud, B. Barbier, H. Martin, und J. Reisse, editors, *Lectures in Astrobiology*, pages 289–352. 2005. 125, 126, 127, 140
- U. Dirks, V. Schirrmacher, und E. Sedlmayr. **Astrophysical dust formation under the influence of temperature fluctuations. A general stochastic approach and its application to AGB winds.** *Astron. & Astrophys.*, 491: 643–662, December 2008. doi: 10.1051/0004-6361:20079243. 17, 55, 75
- S. E. Dodson-Robinson, K. Willacy, P. Bodenheimer, N. J. Turner, und C. A. Beichman. **Ice lines, planetesimal composition and solid surface density in the solar nebula.** *Icarus*, 200:672–693, April 2009. doi: 10.1016/j.icarus.2008.11.023. 131
- J.R. Dormand. **Numerical Methods for Differential Equations: A Computational Approach.** Library of Engineering Mathematics. Taylor & Francis, 1996. ISBN 9780849394331. 88, 89

- B. T. Draine. **Interstellar Dust Grains.** *Annu. Rev. Astron. & Astrophys.*, 41:241–289, 2003. doi: 10.1146/annurev.astro.41.011802.094840.  17, 55, 75
- F. Du und B. Parise. **A hybrid moment equation approach to gas-grain chemical modeling.** *Astron. & Astrophys.*, 530:A131, June 2011. doi: 10.1051/0004-6361/201016262.  26, 30
- J.E. Dyson und D.A. Williams. **Physics of the Interstellar Medium.** Manchester University Press, 1980. ISBN 9780719007972.  x, 42, 43, 93
- R. Emden. **Gaskugeln: Anwendungen der mechanischen Wärmetheorie auf kosmologische und meteorologische Probleme.** B.G. Teubner, 1907. 9, 68
- G. Evans, J.M. Blackledge, und P. Yardley. **Numerical methods for partial differential equations.** Springer undergraduate mathematics series. Springer, 2000. ISBN 9783540761259. 75
- N. J. Evans, II, J. M. C. Rawlings, Y. L. Shirley, und L. G. Mundy. **Tracing the Mass during Low-Mass Star Formation. II. Modeling the Submillimeter Emission from Preprotostellar Cores.** *Astrophys. J.*, 557:193–208, August 2001. doi: 10.1086/321639.  9, 10, 29, 40, 43, 47, 60, 70
- R. F. Ferrante, M. H. Moore, M. M. Spiliotis, und R. L. Hudson. **Formation of Interstellar OCS: Radiation Chemistry and IR Spectra of Precursor Ices.** *Astrophys. J.*, 684:1210–1220, September 2008. doi: 10.1086/590362.  113
- D. R. Flower, G. Pineau des Forêts, und C. M. Walmsley. **Multiply-deuterated species in prestellar cores.** *Astron. & Astrophys.*, 427: 887–893, December 2004. doi: 10.1051/0004-6361:20041464.  21, 102, 106
- K. Furuya, Y. Aikawa, K. Tomida, T. Matsumoto, K. Saigo, K. Tomisaka, F. Hersant, und V. Wakelam. **Chemistry in the First Hydrostatic Core Stage by Adopting Three-dimensional Radiation Hydrodynamic Simulations.** *Astrophys. J.*, 758:86, October 2012. doi: 10.1088/0004-637X/758/2/86.  124, 125
- M. Gålfalk und G. Olofsson. **Herbig-Haro flows in B335.** *Astron. & Astrophys.*, 475:281–300, November 2007a. doi: 10.1051/0004-6361:20077889.  85
- M. Gålfalk und G. Olofsson. **Herbig-Haro flows in L1641N.** *Astron. & Astrophys.*, 466: 579–587, May 2007b. doi: 10.1051/0004-6361:20066852.  85
- D. Galli, M. Walmsley, und J. Gonçalves. **The structure and stability of molecular cloud cores in external radiation fields.** *Astron. & Astrophys.*, 394:275–284, October 2002. doi: 10.1051/0004-6361:20021125.  3, 4, 7, 8, 9, 11, 29, 37, 38, 64, 66, 73
- R. T. Garrod und E. Herbst. **Formation of methyl formate and other organic species in the warm-up phase of hot molecular cores.** *Astron. & Astrophys.*, 457:927–936, October 2006. doi: 10.1051/0004-6361:20065560.  124
- R. T. Garrod, S. L. W. Weaver, und E. Herbst. **Complex Chemistry in Star-forming Regions: An Expanded Gas-Grain Warm-up Chemical Model.** *Astrophys. J.*, 682:283–302, July 2008. doi: 10.1086/588035.  124
- S. Ghahramani. **Fundamentals Of Probability with Stochastic Processes.** Pearson/Prentice Hall, 2005. ISBN 9780131453401. 13, 16, 23, 96, 103
- E. L. Gibb, D. C. B. Whittet, A. C. A. Boogert, und A. G. G. M. Tielens. **Interstellar Ice: The**

- Infrared Space Observatory Legacy.** *Astrophys. J. Suppl.*, 151:35–73, March 2004. doi: 10.1086/381182. ☯. 123, 124, 125
- M.A. Gibson und J. Bruck. **Efficient Exact Stochastic Simulation of Chemical Systems with Many Species and Many Channels.** *J. Phys. Chem. A*, 104(9):1876–1889, 2000. doi: 10.1021/jp993732q. ☯. 24
- D. T. Gillespie. **A general method for numerically simulating the stochastic time evolution of coupled chemical reactions.** *J. Comp. Phys.*, 22:403–434, December 1976. doi: 10.1016/0021-9991(76)90041-3. ☯. 22
- D. T. Gillespie. **A rigorous derivation of the chemical master equation.** *Physica A Statistical Mechanics and its Applications*, 188: 404–425, September 1992. doi: 10.1016/0378-4371(92)90283-V. ☯. 11, 12, 13, 14, 22, 29
- Daniel T. Gillespie. **Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions.** *J. Phys. Chem.*, 81(25):2340–2361, December 1977. doi: 10.1021/j100540a008. ☯. 22
- Daniel T. Gillespie. **Stochastic Simulation of Chemical Kinetics.** *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 58(1):35–55, 2007. doi: 10.1146/annurev.physchem.58.032806.104637. ☯. 12, 14, 24, 25, 26, 27, 29, 30, 34
- F. T. Gillespie. **Approximate accelerated stochastic simulation of chemically reacting systems.** *J Chem Phys*, 115:1716–1733, 2001. ☯. 24
- P. F. Goldsmith. **Molecular Depletion and Thermal Balance in Dark Cloud Cores.** *Astrophys. J.*, 557:736–746, August 2001. doi: 10.1086/322255. ☯. 7, 9, 10, 11, 37, 53, 59, 61, 62, 63, 64
- S. González-Pinto, D. Hernández-Abreu, und J. I. Montijano. **An efficient family of strongly A-stable Runge-Kutta collocation methods for stiff systems and DAEs. Part I: Stability and order results.** *J. Comput. Appl. Math.*, 234(4):1105–1116, June 2010. doi: 10.1016/j.cam.2009.05.027. 28, 91
- N. J. B. Green, T. Toniazzo, M. J. Pilling, D. P. Ruffle, N. Bell, und T. W. Hartquist. **A stochastic approach to grain surface chemical kinetics.** *Astron. & Astrophys.*, 375:1111–1119, September 2001. doi: 10.1051/0004-6361:20010961. ☯. 26
- J.-C. Guillemin, M. Bouyahyi, und E. H. Riague. **Prebiotic, planetary and interstellar chemistry starting from compounds detected in the interstellar medium.** *Adv. Sp. Res.*, 33: 81–87, 2004. doi: 10.1016/j.asr.2003.07.015. ☯. 113, 114
- C. Güttler, J. Blum, A. Zsom, C. W. Ormel, und C. P. Dullemond. **The outcome of protoplanetary dust growth: pebbles, boulders, or planetesimals?. I. Mapping the zoo of laboratory collision experiments.** *Astron. & Astrophys.*, 513:A56, April 2010. doi: 10.1051/0004-6361/200912852. ☯. 58
- E. Hairer, S.P. Nørsett, und G. Wanner. **Solving Ordinary Differential Equations I: Non-stiff Problems.** Springer Series in Computational Mathematics. Springer, 2011. ISBN 9783540566700. ☯. 23, 28, 32, 69, 87, 88, 89, 90
- E. Hairer und G. Wanner. **Solving ordinary differential equations II : Stiff and Differential-Algebraic Problems.** Springer-Verlag, 2010. ISBN 3-642-05220-7. ☯. 9, 16, 23, 28, 32, 87, 89
- P. Hartogh, D. C. Lis, D. Bockelée-Morvan, et al. **Ocean-like water in the Jupiter-family comet 103P/Hartley 2.** *Nature*, 478:218–220, October 2011. doi: 10.1038/nature10519. ☯. 128, 131

- T. I. Hasegawa und E. Herbst. **New gas-grain chemical models of quiescent dense interstellar clouds - The effects of H₂ tunnelling reactions and cosmic ray induced desorption.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 261:83–102, March 1993.  94
- T. I. Hasegawa, E. Herbst, und C. M. Leung. **Models of gas-grain chemistry in dense interstellar clouds with complex organic molecules.** *Astrophys. J. Suppl.*, 82:167–195, September 1992. doi: 10.1086/191713.  94, 95
- C. Helling, J. M. Winters, und E. Sedlmayr. **Circumstellar dust shells around long-period variables. VII. The role of molecular opacities.** *Astron. & Astrophys.*, 358:651–664, June 2000.  43, 61, 95
- E. Herbst. **The chemistry of interstellar space.** *Chem. Soc. Rev.*, 30:168–176, 2001. doi: 10.1039/A909040A. 11, 119
- E. Herbst, Q. Chang, und H. M. Cuppen. **Chemistry on interstellar grains.** *Journal of Physics Conference Series*, 6:18–35, January 2005. doi: 10.1088/1742-6596/6/1/002.  11, 59, 95, 119
- E. Herbst und W. Klemperer. **The Formation and Depletion of Molecules in Dense Interstellar Clouds.** *Astrophys. J.*, 185:505–534, October 1973. doi: 10.1086/152436.  11, 27, 28, 119
- E. Herbst und E. F. van Dishoeck. **Complex Organic Interstellar Molecules.** *Annu. Rev. Astron. & Astrophys.*, 47:427–480, September 2009. doi: 10.1146/annurev-astro-082708-101654.  4, 11, 27, 30, 37, 119, 123, 128
- E. Herbst und V. Wakelam. **Recent Developments in Modelling Gas-Phase and Grain-Surface Chemistry.** In *Molecules in Space and Laboratory*, December 2007.  11, 59, 119
- U. Hincelin, V. Wakelam, B. Commerçon, F. Hersant, und S. Guilloteau. **Survival of Interstellar Molecules to Prestellar Dense Core Collapse and Early Phases of Disk Formation.** *Astrophys. J.*, 775:44, September 2013. doi: 10.1088/0004-637X/775/1/44.  124, 125
- A. C. Hindmarsh. **ODEPACK, A Systematized Collection of ODE Solvers.** *IMACS Transactions on Scientific Computation*, 1:55–64, 1983. 28, 91, 102
- K. Hiraoka, A. Wada, H. Kitagawa, et al. **The Reactions of H and D Atoms with Thin Films of Formaldehyde and Methanol at Cryogenic Temperatures.** *Astrophys. J.*, 620:542–551, February 2005. doi: 10.1086/426958.  21, 102, 106
- D. A. Howe und T. J. Millar. **Alternative routes to deuteration in dark clouds.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 262:868–880, June 1993.  21, 102, 103, 106
- D. A. Howe, T. J. Millar, P. Schilke, und C. M. Walmsley. **Observations of Deuterated Cyanoacetylene in Dark Clouds.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 267:59, March 1994.  21, 102, 106
- Hao Hu und Weitao Yang. **Free Energies of Chemical Reactions in Solution and in Enzymes with Ab Initio Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Methods.** *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 59(1):573–601, 2008. doi: 10.1146/annurev.physchem.59.032607.093618.  12
- C. Hunter. **Series solutions for polytropes and the isothermal sphere.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 328:839–847, December 2001. doi: 10.1046/j.1365-8711.2001.04914.x.  38
- M. Ilgner, T. Henning, A. J. Markwick, und T. J. Millar. **Transport processes and chemical evolution in steady accretion disk flows.** *Astron. & Astrophys.*, 415:643–659, February

2004. doi: 10.1051/0004-6361:20034061. 131
- M. Ilgner und R. P. Nelson. **Turbulent transport and its effect on the dead zone in protoplanetary discs.** *Astron. & Astrophys.*, 483:815–830, June 2008. doi: 10.1051/0004-6361:20079307. 131
- J. K. Jørgensen, C. Favre, S. E. Bisschop, T. L. Bourke, E. F. van Dishoeck, und M. Schmalzl. **Detection of the Simplest Sugar, Glycolaldehyde, in a Solar-type Protostar with ALMA.** *Astrophys. J. Lett.*, 757:L4, September 2012. doi: 10.1088/2041-8205/757/1/L4. 4
- N. Katz, I. Furman, O. Biham, V. Pirronello, und G. Vidali. **Molecular Hydrogen Formation on Astrophysically Relevant Surfaces.** *Astrophys. J.*, 522:305–312, September 1999. doi: 10.1086/307642. 93, 95
- A. D. Keefe, S. L. Miller, G. McDonald, und J. Bada. **Investigation of the prebiotic synthesis of amino acids and RNA bases from CO₂ using FeS/H₂S as a reducing agent.** *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 92(25):11904–11906, 1995. 113
- L. E. Kristensen, L. Amiaud, J.-H. Fillion, F. Dulieu, und J.-L. Lemaire. **H₂, HD, and D₂ abundances on ice-covered dust grains in dark clouds.** *Astron. & Astrophys.*, 527:A44, March 2011. doi: 10.1051/0004-6361/200912124. 106, 107
- S. Kupper, C. Tornow, und P. Gast. **Two Different Sources of Water for the Early Solar Nebula.** *Origins of Life and Evolution of the Biosphere*, 42:81–92, June 2012. doi: 10.1007/s11084-012-9280-7. 4, 7, 10, 27, 29, 30, 98, 120, 123
- L. D. Landau und E. M. Lifshitz. **Course of theoretical physics / by L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Vol. 6.** January 1987. 8, 74
- F. Le Petit, B. Barzel, O. Biham, E. Roueff, und J. Le Bourlot. **Incorporation of stochastic chemistry on dust grains in the Meudon PDR code using moment equations. I. Application to the formation of H₂ and HD.** *Astron. & Astrophys.*, 505:1153–1165, October 2009. doi: 10.1051/0004-6361/200912269. 26
- Y. H. Le Teuff, T. J. Millar, und A. J. Markwick. **The UMIST database for astrochemistry 1999.** *Astron. & Astrophys. Suppl.*, 146:157–168, October 2000. doi: 10.1051/aas:2000265. 21, 99, 114
- H.-H. Lee, E. Herbst, G. Pineau des Forets, E. Roueff, und J. Le Bourlot. **Photodissociation of H₂ and CO and time dependent chemistry in inhomogeneous interstellar clouds.** *Astron. & Astrophys.*, 311:690–707, July 1996. 91, 95, 96
- E. Lellouch, B. Bézard, T. Fouchet, H. Feuchtergruber, T. Encrenaz, und T. de Graauw. **The deuterium abundance in Jupiter and Saturn from ISO-SWS observations.** *Astron. & Astrophys.*, 670:610–622, May 2001. doi: 10.1051/0004-6361:20010259. 120
- C. M. Leung, M. L. Kutner, und K. N. Mead. **On the origin and structure of isolated dark globules.** *Astrophys. J.*, 262:583–589, November 1982. doi: 10.1086/160450. 65, 74
- A. Li und J. M. Greenberg. **A unified model of interstellar dust.** *Astron. & Astrophys.*, 323:566–584, July 1997. 55
- Hong Li, Yang Cao, Linda R. Petzold, und Daniel T. Gillespie. **Algorithms and Software for Stochastic Simulation of Biochemical Reacting Systems.** *Biotechnology Progress*, 24(1):56–61, 2008. doi: 10.1021/bp070255h. 24
- Hong Li und Linda Petzold. **Logarithmic Direct Method for discrete stochastic simulation of chemically reacting systems.** Technical

- report, Department of Computer Science, University of California Santa Barbara, 2006. 24
- Hong Li und Linda Petzold. **Efficient Parallelization of the Stochastic Simulation Algorithm for Chemically Reacting Systems On the Graphics Processing Unit.** *Int. J. High Perform. Comput. Appl.*, 24(2):107–116, May 2010. doi: 10.1177/1094342009106066. 24
- R.L. Liboff. **Kinetic Theory: Classical, Quantum, and Relativistic Descriptions.** Graduate Texts in Contemporary Physics. Springer, 3rd edition, 2003. 12, 13, 29, 66
- J. L. Linsky. **Atomic Deuterium/Hydrogen in the Galaxy.** *Space Sci. Rev.*, 106:49–60, April 2003. doi: 10.1023/A:1024673217736. 120
- A. Lipshtat und O. Biham. **Moment equations for chemical reactions on interstellar dust grains.** *Astron. & Astrophys.*, 400: 585–593, March 2003. doi: 10.1051/0004-6361:20021902. 26
- A. Lipshtat, O. Biham, und E. Herbst. **Enhanced production of HD and D₂ molecules on small dust grains in diffuse clouds.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 348:1055–1064, March 2004. doi: 10.1111/j.1365-2966.2004.07437.x. 21
- F. K. Liu. **Polytropic gas spheres: an approximate analytic solution of the Lane-Emden equation.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 281: 1197–1205, August 1996. 67
- Larry Lok und Roger Brent. **Automatic generation of cellular reaction networks with MolecuLizer 1.0.** *Nat Biotech.*, 23(1):131–136, January 2005. 24
- P. Marigo und B. Aringer. **Low-temperature gas opacity. AESOPUS: a versatile and quick computational tool.** *Astron. & Astrophys.*, 508:1539–1569, December 2009. doi: 10.1051/0004-6361/200912598. 43, 61, 95
- A. J. Markwick, T. J. Millar, und S. B. Charnley. **On the Abundance Gradients of Organic Molecules along the TMC-1 Ridge.** *Astrophys. J.*, 535:256–265, May 2000. doi: 10.1086/308814. 8, 70
- J. S. Mathis, W. Rumpl, und K. H. Nordsieck. **The size distribution of interstellar grains.** *Astrophys. J.*, 217:425–433, October 1977. doi: 10.1086/155591. x, 37, 55, 75
- Makoto Matsumoto und Takuji Nishimura. **Mersenne twister: a 623-dimensionally equi-distributed uniform pseudo-random number generator.** *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, 8(1):3–30, January 1998. doi: 10.1145/272991.272995. ISSN 1049-3301. 23
- James M. McCollum, Gregory D. Peterson, Chris D. Cox, Michael L. Simpson, und Nagiza F. Samatova. **The sorting direct method for stochastic simulation of biochemical systems with varying reaction execution behavior.** *Comput. Biol. Chem.*, 30(1):39–49, February 2006. doi: 10.1016/j.compbiolchem.2005.10.007. 24
- D. McElroy, C. Walsh, A. J. Markwick, M. A. Cordiner, K. Smith, und T. J. Millar. **The UMIST database for astrochemistry 2012.** *Astron. & Astrophys.*, 550:A36, February 2013. doi: 10.1051/0004-6361/201220465. 12, 24, 32
- C. F. McKee und E. C. Ostriker. **Theory of Star Formation.** *Annu. Rev. Astron. & Astrophys.*, 45:565–687, September 2007. doi: 10.1146/annurev.astro.45.051806.110602. 3, 4, 123, 128, 131
- Donald A. McQuarrie. **Stochastic Approach to Chemical Kinetics.** *Journal of Applied Probability*, 4(3):413–478, 1967. 14, 16, 22, 29
- T. J. Millar, A. Bennett, und E. Herbst. **Deuterium fractionation in dense interstellar**










- clouds. *Astrophys. J.*, 340:906–920, May 1989. doi: 10.1086/167444. 21, 102, 106
- T. J. Millar, P. R. A. Farquhar, und K. Willacy. **The UMIST Database for Astrochemistry 1995.** *Astron. & Astrophys. Suppl.*, 121:139–185, January 1997. doi: 10.1051/aas:1997118. 21, 99, 114
- T. Montmerle, J.-C. Augereau, M. Chaussidon, M. Gounelle, B. Marty, und A. Morbidelli. **From Suns to Life: A Chronological Approach to the History of Life on Earth 3. Solar System Formation and Early Evolution: the First 100 Million Years.** *Earth Moon and Planets*, 98:39–95, June 2006. doi: 10.1007/s11038-006-9087-5. 3, 4, 8, 11, 40, 70, 73, 111, 128
- M. J. Mumma und S. B. Charnley. **The Chemical Composition of Comets-Emerging Taxonomies and Natal Heritage.** *Annu. Rev. Astron. & Astrophys.*, 49:471–524, September 2011. doi: 10.1146/annurev-astro-081309-130811. 123, 124, 125, 126, 127, 128, 129, 130, 131, 140
- N. Murray. **Star Formation Efficiencies and Lifetimes of Giant Molecular Clouds in the Milky Way.** *Astrophys. J.*, 729:133–+, March 2011. doi: 10.1088/0004-637X/729/2/133. 3
- P. Natarajan und D. Lynden-Bell. **An Analytic Approximation to the Isothermal Sphere.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 286:268–270, April 1997. 38
- A. Natta. **Course 6: Star Formation.** In F. Casoli, J. Lequeux, & F. David, editor, *Infrared Space Astronomy, Today and Tomorrow*, pages 193–+, 2000. 3, 4, 8, 66, 131
- L. A. M. Nejad. **A Comparison of Stiff ODE Solvers for Astrochemical Kinetics Problems.** *Astrophys. & Sp. Sci.*, 299:1–29, September 2005. doi: 10.1007/s10509-005-2100-z. 16, 90, 91
- L. A. M. Nejad und R. Wagenblast. **Time dependent chemical models of spherical dark clouds.** *Astron. & Astrophys.*, 350:204–229, October 1999. 27, 28
- K. I. Öberg, A. C. A. Boogert, K. M. Pontopidan, S. van den Broek, E. F. van Dishoeck, S. Bottinelli, G. A. Blake, und N. J. Evans, II. **The Spitzer Ice Legacy: Ice Evolution from Cores to Protostars.** *Astrophys. J.*, 740:109, October 2011. doi: 10.1088/0004-637X/740/2/109. 123, 124, 125
- J. E. O’Donnell und J. S. Mathis. **Dust Grain Size Distributions and the Abundance of Refractory Elements in the Diffuse Interstellar Medium.** *Astrophys. J.*, 479:806–+, April 1997. doi: 10.1086/303903. 55
- K. A. Olive, G. Steigman, und T. P. Walker. **Primordial nucleosynthesis: theory and observations.** *Phys. Rep.*, 333:389–407, August 2000. doi: 10.1016/S0370-1573(00)00031-4. 98
- C. W. Ormel, D. Paszun, C. Dominik, und A. G. G. M. Tielens. **Dust coagulation and fragmentation in molecular clouds. I. How collisions between dust aggregates alter the dust size distribution.** *Astron. & Astrophys.*, 502:845–869, August 2009. doi: 10.1051/0004-6361/200811158. 58
- J. Oró. **Chemical synthesis of lipids and the origin of life.** *Journal of Biological Physics*, 20: 135–147, 1995. doi: 10.1007/BF00700430. 4, 113, 114
- J. Oró. **Organic Matter and the Origin of Life in the Solar System.** In G. Lemarchand und K. Meech, editors, *Bioastronomy 99*, volume 213 of *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, page 285, 2000. 4
- Y. Osamura, H. Roberts, und E. Herbst. **The Gas-Phase Deuterium Fractionation of Formaldehyde.** *Astrophys. J.*, 621:348–358, March 2005. doi: 10.1086/427474. 21, 102, 106

- V. Ossenkopf und T. Henning. **Dust opacities for protostellar cores.** *Astron. & Astrophys.*, 291: 943–959, November 1994. ☉. 43, 58
- L. Pagani, A. Bacmann, F. Motte, L. Cambrésy, M. Fich, G. Lagache, M.-A. Miville-Deschênes, J.-R. Pardo, und A. J. Apponi. **L183 (L134N) Revisited. II. The dust content.** *Astron. & Astrophys.*, 417:605–613, April 2004. doi: 10.1051/0004-6361:20034087. ☉. 8, 29, 70, 124
- R. Pascal, L. Boiteau, P. Forterre, et al. **Prebiotic Chemistry — Biochemistry — Emergence of Life (4.4–2 Ga).** In M. Gargaud, P. Claeys, P. López-García, H. Martin, T. Montmerle, R. Pascal, und J. Reisse, editors, *From Suns to Life: A Chronological Approach to the History of Life on Earth*, pages 153–203. 2006. 4, 113
- A. B. Peck und A. J. Beasley. **High resolution sub-millimeter imaging with ALMA.** *Journal of Physics Conference Series*, 131(1): 012049, October 2008. doi: 10.1088/1742-6596/131/1/012049. ☉. 29
- R. Peng, W. D. Langer, T. Velusamy, T. B. H. Kuiper, und S. Levin. **Low-Mass Clumps in TMC-1: Scaling Laws in the Small-Scale Regime.** *Astrophys. J.*, 497:842–+, April 1998. doi: 10.1086/305483. ☉. 8, 40, 70
- M. J. Pilling. **Radical-Radical reactions.** *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 47(1):81–108, 1996. doi: 10.1146/annurev.physchem.47.1.81. ☉. 12
- Michael J. Pilling und Struan H. Robertson. **Master Equation Models for chemical reactions of importance in combustion.** *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 54(1):245–275, 2003. doi: 10.1146/annurev.physchem.54.011002.103822. ☉. 12
- H. C. Plummer. **On The Problem of Distribution in Globular Star Clusters.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 71:460–472, 1911. ☉. xi, 40, 55
- J. B. Pollack, C. P. McKay, und B. M. Christoferson. **A calculation of the Rosseland mean opacity of dust grains in primordial solar system nebulae.** *Icarus*, 64:471–492, December 1985. doi: 10.1016/0019-1035(85)90069-7. ☉. x, 10, 11, 37, 55, 56, 59
- S. S. Prasad und W. T. Huntress, Jr. **A model for gas phase chemistry in interstellar clouds. I - The basic model, library of chemical reactions, and chemistry among C, N, and O compounds.** *Astrophys. J. Suppl.*, 43:1–35, May 1980. doi: 10.1086/190665. ☉. 28
- William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, und Brian P. Flannery. **Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing.** Cambridge University Press, New York, NY, USA, 3 edition, 2007. ISBN 0521880688, 9780521880688. ☉. 23, 45, 50, 61, 62, 63, 64, 73, 84, 89
- J. G. L. Rae, N. J. B. Green, T. W. Hartquist, M. J. Pilling, und T. Toniazzo. **Diffusive grain-surface chemistry involving the atoms and diatomic molecules of two elements.** *Astron. & Astrophys.*, 405:387–396, July 2003. doi: 10.1051/0004-6361:20030415. ☉. 26
- Rajesh Ramaswamy, Nérido G. Segredo, und Ivo F. Sbalzarini. **A new class of highly efficient exact stochastic simulation algorithms for chemical reaction networks.** *J. Chem. Phys.*, 130(24):244104+, 2009. 24
- F. Raulin, P. Coll, und R. Navarro-González. **Prebiotic Chemistry: Laboratory Experiments and Planetary Observation.** In M. Gargaud, B. Barbier, H. Martin, und J. Reisse, editors, *Lectures in Astrobiology*, pages 449–471. 2005. 4, 113, 114
- H. Roberts und E. Herbst. **The abundance of gaseous H₂O and O₂ in cores of dense interstellar clouds.** *Astron. & Astrophys.*, 395: 233–242, November 2002. doi: 10.1051/0004-6361:20021280. ☉. 3

- S. D. Rodgers und S. B. Charnley. **Nitrogen Isotopic Fractionation of Interstellar Nitriles.** *Astrophys. J.*, 689:1448–1455, December 2008a. doi: 10.1086/592195. 102, 106
- S. D. Rodgers und S. B. Charnley. **Nitrogen superfractionation in dense cloud cores.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 385:L48–L52, March 2008b. doi: 10.1111/j.1745-3933.2008.00431.x. 102, 106
- E. Roueff, B. Parise, und E. Herbst. **Deuterium fractionation in warm dense interstellar clumps.** *Astron. & Astrophys.*, 464: 245–252, March 2007. doi: 10.1051/0004-6361:20066531. 21, 102, 106
- P. Rousselot, O. Pirali, E. Jehin, et al. **Toward a Unique Nitrogen Isotopic Ratio in Cometary Ices.** *Astrophys. J. Lett.*, 780:L17, January 2014. doi: 10.1088/2041-8205/780/2/L17. 131
- D. P. Ruffle und E. Herbst. **New models of interstellar gas-grain chemistry - I. Surface diffusion rates.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 319:837–850, December 2000. doi: 10.1046/j.1365-8711.2000.03911.x. 95
- Y. Saad. **Iterative Methods for Sparse Linear Systems.** Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, 2nd edition, 2003. 91
- N. Sakai, T. Sakai, T. Hirota, und S. Yamamoto. **Abundant Carbon-Chain Molecules toward the Low-Mass Protostar IRAS 04368+2557 in L1527.** *Astrophys. J.*, 672:371–381, January 2008. doi: 10.1086/523635. 4
- Kevin R. Sanft, Sheng Wu, Min Roh, Jin Fu, Rone Kwei Lim, und Linda R. Petzold. **StochKit2: software for discrete stochastic simulation of biochemical systems with events.** *Bioinformatics*, 27(17):2457–2458, 2011. 24
- B. D. Savage und K. R. Sembach. **Interstellar Abundances from Absorption-Line Observations with the Hubble Space Telescope.** *Annu. Rev. Astron. & Astrophys.*, 34:279–330, 1996. doi: 10.1146/annurev.astro.34.1.279. 98
- M. Schmalzl, J. Kainulainen, S. P. Quanz, J. Alves, A. A. Goodman, T. Henning, R. Launhardt, J. E. Pineda, und C. G. Román-Zúñiga. **Star Formation in the Taurus Filament L 1495: From Dense Cores to Stars.** *Astrophys. J.*, 725:1327–1336, December 2010. doi: 10.1088/0004-637X/725/1/1327. 3
- D. Semenov, T. Henning, C. Helling, M. Ilgner, und E. Sedlmayr. **Rosseland and Planck mean opacities for protoplanetary discs.** *Astron. & Astrophys.*, 410:611–621, November 2003. doi: 10.1051/0004-6361:20031279. 43, 61, 95
- D. Semenov, F. Hersant, V. Wakelam, et al. **Chemistry in disks. IV. Benchmarking gas-grain chemical models with surface reactions.** *Astron. & Astrophys.*, 522:A42, November 2010. doi: 10.1051/0004-6361/201015149. 7, 8, 10, 12, 91, 93, 94, 95, 98, 99, 100, 102, 103, 106, 111, 113, 114, 120, 121, 125, 127, 130
- Y. Shinnaka, H. Kawakita, H. Kobayashi, M. Nagashima, und D. C. Boice. **$^{14}\text{NH}_2/^{15}\text{NH}_2$ Ratio in Comet C/2012 S1 (ISON) Observed during its Outburst in 2013 November.** *Astrophys. J. Lett.*, 782:L16, January 2014. doi: 10.1088/2041-8205/780/2/L17. 131
- O. Sipilä, J. Harju, und M. Juvela. **On the stability of non-isothermal Bonnor-Ebert spheres.** *Astron. & Astrophys.*, 535:A49, November 2011. doi: 10.1051/0004-6361/201117547. 7, 8, 9, 11, 37, 66, 68, 69
- O. Sipilä, E. Hugo, J. Harju, O. Asvany, M. Juvela, und S. Schlemmer. **Modelling line emission of deuterated H_3^+ from prestellar cores.**

- Astron. & Astrophys.*, 509:A98, January 2010. doi: 10.1051/0004-6361/200913350. ☞. 7, 8, 9, 11, 37, 68, 69
- I. W. M. Smith. **Low Temperatures and Cold Molecules.** September 2008. ☞. 11, 98, 119
- I. W. M. Smith, E. Herbst, und Q. Chang. **Rapid neutral-neutral reactions at low temperatures: a new network and first results for TMC-1.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 350: 323–330, May 2004. doi: 10.1111/j.1365-2966.2004.07656.x. ☞. 28, 70, 92, 93, 99, 114
- M. Spaans und J. Silk. **The Polytropic Equation of State of Interstellar Gas Clouds.** *Astrophys. J.*, 538:115–120, July 2000. doi: 10.1086/309118. ☞. 67
- M. Spaans und J. Silk. **The Polytropic Equation of State of Primordial Gas Clouds.** *Astrophys. J.*, 626:644–648, June 2005. doi: 10.1086/430105. ☞. 67
- T. Stantcheva und E. Herbst. **Deuterium fractionation on interstellar grains studied with the direct master equation approach.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 340:983–988, April 2003. doi: 10.1046/j.1365-8711.2003.06368.x. ☞. 17, 18, 20, 29, 30
- T. Stantcheva und E. Herbst. **Models of gas-grain chemistry in interstellar cloud cores with a stochastic approach to surface chemistry.** *Astron. & Astrophys.*, 423: 241–251, August 2004. doi: 10.1051/0004-6361:20040433. ☞. 17, 20, 29, 30
- T. Stantcheva, V. I. Shematovich, und E. Herbst. **On the master equation approach to diffusive grain-surface chemistry: The H, O, CO system.** *Astron. & Astrophys.*, 391:1069–1080, September 2002. doi: 10.1051/0004-6361:20020838. ☞. 17, 18, 20, 29
- M. F. Sterzik, R. H. Durisen, und H. Zinnecker. **How do binary separations depend on cloud initial conditions?** *Astron. & Astrophys.*, 411: 91–97, November 2003. doi: 10.1051/0004-6361:20034219. ☞. 3
- A. Stutz, R. Launhardt, H. Linz, O. Krause, T. Henning, J. Kainulainen, M. Nielbock, J. Steinacker, und P. André. **Dust-temperature of an isolated star-forming cloud: Herschel observations of the Bok globule CB244.** *Astron. & Astrophys.*, 518:L87+, July 2010. doi: 10.1051/0004-6361/201014537. ☞. 29, 58
- Z. Szallasi, J. Stelling, und V. Periwal. **System Modeling in Cellular Biology: From Concepts to Nuts and Bolts.** Bradford Books. MIT Press, 2010. ISBN 9780262514224. 22
- R. Terzieva und E. Herbst. **The possibility of nitrogen isotopic fractionation in interstellar clouds.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 317:563–568, September 2000. doi: 10.1046/j.1365-8711.2000.03618.x. ☞. 102, 106
- P. Thaddeus. **The prebiotic molecules observed in the interstellar gas.** *Phil. Trans. R. Soc. B*, 361(1474):1681–1687, 2006. doi: 10.1098/rstb.2006.1897. 4
- A. G. G. M. Tielens. **Surface chemistry of deuterated molecules.** *Astron. & Astrophys.*, 119: 177–184, March 1983. ☞. 21, 102, 106
- C. Tornow, P. Gast, U. Motschmann, S. Kupper, E. Kührt, und I. Pelivan. **Water formation in early solar nebula: II-Collapsing cloud core.** *Planet. Space Sci.*, 98:233–253, August 2014a. doi: 10.1016/j.pss.2013.12.009. ☞. 123
- C. Tornow, P. Gast, I. Pelivan, S. Kupper, E. Kührt, und U. Motschmann. **Water formation in early solar nebula: I. Quasi-stationary cloud core.** *Planet. Space Sci.*, 98:216–232, August 2014b. doi: 10.1016/j.pss.2013.12.010. ☞. 107, 124
- C. Tornow, E. Kührt, S. Kupper, und U. Motschmann. **Interaction between gas and ice phase in the three periods of the solar nebula.** In J. A. Fernandez, D. Lazzaro, D. Prialnik,

- p>und R. Schulz, editors,
- IAU Symposium*
- , volume 263 of
- IAU Symposium*
- , pages 50–54, 2010. doi: 10.1017/S1743921310001493. 4
- C. Tornow, E. Kührt, und U. Motschmann. **Pre-Cometary Ice Composition from Hot Core Chemistry.** *Astrobiology*, 5:632–650, 2005. doi: 10.1089/ast.2005.5.632. 4
- R. Trobec, M. Vajteršic, und P. Zinterhof. **Parallel Computing: Numerics, Applications, and Trends.** Parallel Computing: Numerics, Applications, and Trends. Springer, 2009. ISBN 9781848824089. 23
- W. M. Tscharnuter, J. Schönke, H.-P. Gail, M. Tieloff, und E. Lüttjohann. **Protostellar collapse: rotation and disk formation.** *Astron. & Astrophys.*, 504:109–113, September 2009. doi: 10.1051/0004-6361/200912120. 4
- John S. Tse. **Ab initio molecular dynamics with Density Functional Theory.** *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 53(1):249–290, 2002. doi: 10.1146/annurev.physchem.53.090401.105737. 12
- T. Tsuji und K. Ohnaka. **Opacities of very cool and dense Gaseous mixtures-An Extension of Stellar Opacities to the substellar regime.** In S. J. Adelman und W. L. Wiese, editors, *Astrophysical Applications of Powerful New Databases*, volume 78 of *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, pages 69–73, 1995. 43, 61, 95
- A. Unsöld und B. Baschek. **The New Cosmos: An Introduction to Astronomy and Astrophysics.** Springer, 2001. ISBN 9783540678779. 70
- E. F. van Dishoeck und G. A. Blake. **Chemical Evolution of Star-Forming Regions.** *Annu. Rev. Astron. & Astrophys.*, 36:317–368, 1998. doi: 10.1146/annurev.astro.36.1.317. 3, 4, 5, 11, 69, 70, 85, 111, 119, 123, 128, 131
- A. I. Vasyunin, D. A. Semenov, D. S. Wiebe, und T. Henning. **A Unified Monte Carlo Treatment of Gas-Grain Chemistry for Large Reaction Networks. I. Testing Validity of Rate Equations in Molecular Clouds.** *Astrophys. J.*, 691:1459–1469, February 2009. doi: 10.1088/0004-637X/691/2/1459. 23, 24, 29, 30
- R. Visser, S. D. Doty, und E. F. van Dishoeck. **The chemical history of molecules in circumstellar disks. II. Gas-phase species.** *Astron. & Astrophys.*, 534:A132, October 2011. doi: 10.1051/0004-6361/201117249. 29, 131
- R. Visser, E. F. van Dishoeck, S. D. Doty, und C. P. Dullemond. **The chemical history of molecules in circumstellar disks. I. Ices.** *Astron. & Astrophys.*, 495:881–897, March 2009. doi: 10.1051/0004-6361/200810846. 29, 131
- V. Wakelam, E. Herbst, J.-C. Loison, et al. **A Kinetic Database for Astrochemistry (KIDA).** *Astrophys. J. Suppl.*, 199:21, March 2012. doi: 10.1088/0067-0049/199/1/21. 99, 114
- V. Wakelam, E. Herbst, und F. Selsis. **The effect of uncertainties on chemical models of dark clouds.** *Astron. & Astrophys.*, 451:551–562, May 2006. doi: 10.1051/0004-6361:20054682. 7, 10, 28, 96, 98, 120
- C. M. Walmsley, D. R. Flower, und G. Pineau des Forêts. **Complete depletion in prestellar cores.** *Astron. & Astrophys.*, 418:1035–1043, May 2004. doi: 10.1051/0004-6361:20035718. 21, 102, 106
- K. J. Walsh und A. Morbidelli. **The effect of an early planetesimal-driven migration of the giant planets on terrestrial planet formation.** *Astron. & Astrophys.*, 526:A126, February 2011. doi: 10.1051/0004-6361/201015277. 4, 128
- E. Weinan und E. Vanden-Eijnden. **Transition-Path Theory and Path-Finding Algorithms**

- for the Study of Rare Events.** *Annu. Rev. Phys. Chem.*, 61(1):391–420, 2010. doi: 10.1146/annurev.physchem.040808.090412. . 12
- A. P. Whitworth und M. R. Bate. **Dust dynamics in dense molecular cores.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 333:679–686, July 2002. doi: 10.1046/j.1365-8711.2002.05448.x. . vi, 10, 40, 50, 53, 54, 55, 58, 65, 74, 75, 81, 82, 83
- A. P. Whitworth, H. M. J. Boffin, und N. Francis. **Gas cooling by dust during dynamical fragmentation.** *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, 299:554–561, September 1998. doi: 10.1046/j.1365-8711.1998.01813.x. . 62
- K. Willacy. **The Chemistry of Multiply Deuterated Molecules in Protoplanetary Disks. I. The Outer Disk.** *Astrophys. J.*, 660:441–460, May 2007. doi: 10.1086/512796. . 21, 102, 106
- J. Woodall, M. Agúndez, A. J. Markwick-Kemper, und T. J. Millar. **The UMIST database for astrochemistry 2006.** *Astron. & Astrophys.*, 466:1197–1204, May 2007. doi: 10.1051/0004-6361:20064981. . 12, 21, 28, 92, 93, 99, 114
- C. J. Yate und T. J. Millar. **Turbulent diffusion and mixing in interstellar dark clouds with adsorption onto grains.** *Astron. & Astrophys.*, 399:553–565, February 2003. doi: 10.1051/0004-6361:20021813. . 65, 74
- S. Zhang und J.M. Jin. **Computation of special functions.** A Wiley-Interscience Publication. John Wiley, 1996. . 50
- V. Zubko, E. Dwek, und R. G. Arendt. **Interstellar Dust Models Consistent with Extinction, Emission, and Abundance Constraints.** *Astrophys. J. Suppl.*, 152:211–249, June 2004. doi: 10.1086/382351. . x, 10, 11, 37, 56, 59, 75
- A. Zucconi, C. M. Walmsley, und D. Galli. **The dust temperature distribution in pre-stellar cores.** *Astron. & Astrophys.*, 376:650–662, September 2001. doi: 10.1051/0004-6361:20010778. . ix, 9, 10, 11, 37, 38, 40, 42, 43, 47, 49, 53, 58, 59, 60, 61, 64, 70, 71, 73, 112

Erklärung

Ich erkläre, dass diese Arbeit in Übereinstimmung mit den dafür vorgesehen Regularien zustande gekommen ist. Insbesondere ist keine verbotene Unterstützung von fremder Seite, sei es durch Firmen oder Institutionen, in Anspruch genommen worden. Das vorliegende Werk ist die Arbeit des Autors, übernommene Ideen bzw. Inspirationen, die in dieser Arbeit verwendet wurden, sind in dieser Arbeit mit Zitaten oder in anderer geeigneter Art und Weise als solche kenntlich gemacht. Die benutzten Hilfsmittel sind somit vollständig angegeben.

Diese Arbeit wurde zuvor keinem anderen deutschen oder ausländischen Promotionsverfahren unterzogen. Der Inhalt dieser Arbeit ist nicht schon zuvor für eine Diplom- oder vergleichbare Prüfungsarbeit verwendet worden.

Stefan Kupper

Zeuthen, 28. Juli 2015

Danksagung

Diese Arbeit als Ergebnis von mehr als 3 Jahren akademischer Mühen in den Händen zu halten bedeutet, dass man natürlich all jenen besonderen Dank schuldet, die diese Arbeit wissenschaftlich unterstützt haben. Daher bin ich vor allem Prof. Uwe Motschmann, Dr. Carmen Tornow und Dr. Ekkehard Kührt zu Dank verpflichtet. Sie waren unmittelbar verantwortlich dafür, die am DLR Berlin geleistete wissenschaftliche Arbeit zu steuern und in die Dissertation zu überführen, welche dem Leser vorliegt. Da diese Dissertation letztlich viel mehr Zeit benötigt hat als gedacht, waren ihre Anstrengungen umso bedeutsamer und ihre Hilfe umso wichtiger.

Eine ähnliche Unterstützung habe ich von den Kollegen am DLR-Institut erhalten. Ich möchte mich bei ihnen auch für die entspannte und herzliche Art und Weise bedanken, mit der wir miteinander umgegangen sind. Bei Niko möchte ich mich dafür bedanken, dass er mich an die Arbeitsweise im DLR herangeführt hat und mir mit Rat und Tat zur Seite stand, wenn ich Probleme im Umgang mit den Unix-Systemen des Instituts hatte. Bei Michael möchte ich mich dafür bedanken, dass während der langen Zeit in der wir Zimmernachbarn waren immer Zeit für Gespräche professioneller wie auch allgemeinerer Art war. Philipp möchte ich dafür danken, dass er Vorschläge und Einwände vorbringen konnte, die oft geholfen haben die Arbeit zu verbessern und sie schneller und effizienter weiterzuführen. Bedanken möchte ich mich auch bei Robin, Ekkehard und den anderen, nur zeitweise am Institut arbeitenden Kollegen, die mir mit anregenden Gesprächen während ihrer Zeit am Institut geholfen haben. Ich denke ich kann nicht allen, denen ich zu Dank verpflichtet bin, in dieser Danksagung gerecht werden. Ich bin ihnen für ihre Gesellschaft und Unterstützung während meiner Zeit am Institut aber sehr dankbar.

Schließlich möchte ich mich bei meiner Familie vor allen Dingen für die für diese Arbeit erforderliche Geduld bedanken.

Acknowledgement

With the thesis being the result of some 3+ years academic efforts you are quite naturally most indebted to the professional assistance you received. Thus I am first and mostly indebted to Prof. Uwe Motschmann, Dr. Carmen Tornow and Dr. Ekkehard Kührt who were directly responsible in steering and channelling the scientific work done at the DLR-Institute in Berlin into an actual output which in form of this Thesis lies before the reader. As it turned out producing this thesis took a much longer period than expected which made their efforts even more important and their advice even more helpful.

I want to thank my colleagues in the DLR institute for similar assistance as well as for the relaxing and often cordially atmosphere with which we communicated amongst ourselves. I want to thank Niko for introducing me to the way the DLR worked and for assistance in working with the unix systems provided by the institute whenever I was in need of it. I would like to thank Michael with whom I spent quite a long time sharing a room discussing professional matters as well as others. I would like to thank Philipp who often provided useful suggestions that more than once turned out to be not only accelerating the daily business but also hinting at flaws that might otherwise would not have been noticed. There were at times other colleagues in our group and I would like Robin and Ekkehard and all others for some fruitful discussions during their stay at the institute. I feel I can not all of those I am indebted to do proper justice in this acknowledgement but I am much thankful for their assistance and company during my stay at the institute.

Finally I would like to thank my family above all for the patience it took before the thesis finally was completed.